



angefertigt am Fraunhofer IOF

Abteilung optische Schichten

Diplomarbeit

Begründung und Optimierung eines Dünnschichtmodells zur Prognose
optischer Eigenschaften oxidischer Beschichtungen durch in-situ
Überwachung des Aufdampfprozesses.

Karen Friedrich

Jena, den 28. September 2009

Prüfer: Dr. rer. nat. hab. Olaf Stenzel

Prüfer: Prof. Dr. rer. nat. hab. Karl Heinz Hoffmann

Friedrich, Karen

Begründung und Optimierung eines Dünnschichtmodells zur Prognose optischer Eigenschaften oxidischer Beschichtungen durch in-situ Überwachung des Aufdampfprozesses.

Diplomarbeit, angefertigt am Fraunhofer IOF

Technische Universität Chemnitz, September 2009

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	v
Tabellenverzeichnis	ix
1. Einleitung	1
2. Theoretische und technische Grundlagen	4
2.1. Grundlagen der Beschreibung von Dünnschichtspektren	4
2.1.1. Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie . .	4
2.1.2. Das Oszillatormodell	7
2.1.3. Das Dünnschichtspektrum	8
2.2. Stand von Wissenschaft und Technik	12
2.2.1. Allgemeine Entwicklung	12
2.2.2. Stand der Technik	13
2.2.3. Abweichung vom homogenen/isotropen Schichtmodell mit glat- ten Grenzflächen	16
2.3. Ursache von Fehlern in Schichtdicken und Materialgrößen	21
2.3.1. Schwankungen in den optischen Konstanten	21
2.3.2. Schichtdickenfehler bei Schwingquarzabscheidung	22
2.3.3. Schichtdickenschwankungen im Fall optischer Kontrolle am be- wegten Substrat	23
2.4. Computergestützte Simulation des Beschichtungsprozesses: Erste Mo- dellvorstellung	24
2.4.1. Systematische und zufällige Fehler	24
2.4.2. Schwankungen der optischen Konstanten	24
2.4.3. Abweichung der Schichtdicke vom Sollwert im Fall der Schicht- dickenkontrolle mit Schwingquarz	26
2.4.4. Abweichung der Schichtdicke vom Sollwert im Fall von BBM .	26

2.4.5. Shift	28
2.5. Vorstellung Designs und Spezifikationen	28
2.5.1. Antireflex-Design	28
2.5.2. Strahlteiler	30
2.5.3. Bewertungskriterium für die Beurteilung des Beschichtungser- folges	30
3. Experimentelle Arbeiten	32
3.1. Beschichtung der Einzelschichten, sowie der Demonstratoren	32
3.2. Messungen von Transmission und Reflexion	35
3.3. Vermessung der Oberflächenrauheit	38
4. Ergebnisse	41
4.1. Abscheidung ohne laufende Designkorrekturen	41
4.1.1. Simulation	41
4.1.2. Experimentelle Ergebnisse	45
4.1.3. Diskussion	46
4.2. Abscheidung mit laufenden Designkorrekturen	51
4.2.1. Simulation	51
4.2.2. Experimentelle Ergebnisse	56
4.2.3. Diskussion	57
5. Diskussion und Schlussfolgerungen	60
5.1. Bewertung der Modellvorstellung	60
5.2. Schlussfolgerungen für die Beschichtungspraxis	62
A. Reproduzierbarkeitsversuche	65
A.1. Vermessung der Einzelschichten	65
A.1.1. Transmissionsspektren	65
A.1.2. Rauheitsmessungen	68
A.1.3. Shiftmessungen	69
A.2. Auswertung der Reproduzierbarkeitsversuche	70
A.3. Messung und Auswertung der Intensitätspektren	77
B. Mehrschichtsysteme	80

Literaturverzeichnis

82

Abbildungsverzeichnis

1.1. Schematische Darstellung des Vergleichs zwischen der adaptiven und einer konventionellen Fertigungskette	2
2.1. Schematische Darstellung der Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung und dem betrachteten Medium	5
2.2. Grafische Darstellung von Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion $\epsilon(\nu) = \epsilon'(\nu) + i\epsilon''(\nu)$ im Vergleich zu den Parametern Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient K als Funktion der Wellenzahl ν	8
2.3. Schematische Darstellung von Reflexion und Transmission an einer dünnen Schicht	9
2.4. Transmissionsspektren im Vergleich: Unbeschichtetes Substrat, verspiegelnde und entspiegelnde Schicht	11
2.5. Hochvakuumbeschichtungsanlage SYRUSpro 1100	13
2.6. Implementierung des breitband optischen Monitoriersystems OptiMon in der SYRUSpro 1100	15
2.7. Schematische Darstellung einer rauen Grenzfläche, beschrieben durch Fluktuationen im Höhenprofil $z(x)$ entsprechend einer Dichteverteilung $P_j(z)$	16
2.8. Schematische Darstellung der Röntgenreflektometriemessungen	16
2.9. Intensität als Funktion des Winkels Θ zwischen Oberfläche und Röntgenstrahl für verschiedene rms-Rauheiten im Fall der Röntgenreflektometrie	17
2.10. Schematische Darstellung eines inhomogenen Brechzahlprofils	18
2.11. Transmissionsspektren einer porösen Nb_2O_5 -Einzelschicht in-situ gemessen (Striche) und unter Luft bei Raumtemperatur (Linie); Shift = -2,0% [Ste09b].	20

2.12. Modellsystem einer dünnen Schicht mit Poren	21
2.13. Vergleich a) korrelierter und b) unkorrelierter Oszillatorparameter an TiO ₂ -Einzelschichten. Formelzeichen gemäß Gleichung (2.13).	25
2.14. Design 1: (a) Brechzahlverlauf über physikalische Dicke und (b) theo- retisches Reflexionsspektrum. Design 2: (c) Brechzahlverlauf über phy- sikalische Dicke und (d) theoretisches Reflexionsspektrum.	29
2.15. Brechzahlverlauf über physikalische Dicke (a) und theoretisches Trans- missionsspektrum (b) des Strahteilers	30
3.1. Messeinsatz zur a) Transmissions- und b) Reflexionsmessung (am IOF entwickelt) für einen Einfallswinkel von 6°	35
3.2. Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionsspektren der Einzel- schichten des Materials SiO ₂ für Solldicke 200 nm	36
3.3. Versuche zur Messungenauigkeit: Transmission einer 10 mal vermesse- nen SiO ₂ -Einzelschicht für Solldicke 200 nm	37
3.4. Verwendetes Goniometer MZ VI	38
4.1. Schematische Darstellung des Programmablaufs	43
4.2. Simulationen der Beschichtungen (grau) des ersten AR-Designs für a) Schwingquarz Spez 1 und b) Schwingquarz Spez 2, außerdem für c) OptiMon 3.5 Spez 1, sowie d) OptiMon 3.5 Spez 2. Auch zu sehen sind e) OptiMon 3.14 Spez 1 und f) OptiMon 3.14 Spez 2. Zusätzlich sind die Experimente mittels BBM und in-situ kalibriertem Schwing- quarz (rot) und mittels ex-situ kalibriertem Schwingquarz (blau) dar- gestellt.	47
4.3. Simulationen der Beschichtungen (grau) des zweiten AR-Designs für a) Schwingquarz Spez 1 und b) Schwingquarz Spez 2, außerdem für c) OptiMon 3.5 + Schwingquarz (hybrid) Spez 1, d) OptiMon 3.5 + Schwingquarz (hybrid) Spez 2, e) OptiMon 3.14 Spez 1 und f) OptiMon 3.14 Spez 2. Des Weiteren sind die Experimente mittels BBM und in- situ kalibriertem Schwingquarz (rot) und mittels ex-situ kalibriertem Schwingquarz (blau) dargestellt.	49
4.4. Gutausbeute als Funktion der Anzahl der Simulationsdurchläufe für a) Design 1 und b) Design 2	50

4.5. Schematische Darstellung der Reoptimierungsroutine	52
4.6. Gutausbeuten mit und ohne Reoptimierung zum Vergleich für a) Abscheidung mittels OptiMon 3.14 und b) mit Schwingquarz	54
4.7. Simulationen des Strahlteilers unter Verwendung von OptiMon 3.14 a) ohne und b) mit Reoptimierung, sowie bei Schwingquarzabscheidung c) ohne und d) mit Reoptimierung. Rote Transmissionspektren stellen erfolgreiche Simulationen und der hellblau unterlegte Bereich das erlaubte Transmissionsvermögen dar.	55
4.8. Transmissionspektren der Strahlteiler für Schichtdickenkontrolle mit a) Schwingquarz und b) OptiMon 3.14. Der blau unterlegte Bereich entspricht der erlaubten Transmission.	57
4.9. Vergleich der optischen Konstanten a) Brechungsindex und b) Extinktionskoeffizient der Ta ₂ O ₅ -Einzelschichten vor und nach dem Plasmakathodenwechsel, sowie der Reproduzierbarkeitsversuche.	58
A.1. Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionspektren der Einzelschichten des Materials Nb ₂ O ₅ für Solldicke 200 nm	65
A.2. Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionspektren der Einzelschichten des Materials Ta ₂ O ₅ für Solldicke 200 nm	66
A.3. Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionspektren der Einzelschichten des Materials TiO ₂ für Solldicke 100 nm	66
A.4. Transmissionspektren einer 10 mal vermessenen Ta ₂ O ₅ mit Solldicke 200 nm als Funktion der Wellenlänge	67
A.5. Gemessene (Punkte) und mittels GenX simulierte (Linie) Intensitätsspektren von a) SiO ₂ , b) Nb ₂ O ₅ , c) Ta ₂ O ₅ und d) TiO ₂	68
A.6. Transmissionsvermögen bei Messung unter Luft und Vakuum für a) SiO ₂ , b) Nb ₂ O ₅ , c) Ta ₂ O ₅ und d) TiO ₂	69
A.7. Vergleich der Transmission einer SiO ₂ -Einzelschicht mit 200 nm Solldicke. Gemessenes (Punkt) und mittels LCalc angepasstes Spektrum (Linie).	72
A.8. Prozentuale Standardabweichung der Oszillatorparameter bei Auswertung mittels LCalc von a) SiO ₂ , b) Nb ₂ O ₅ , c) Ta ₂ O ₅ und d) TiO ₂ . . .	72
A.9. Schichtdickenschwankungen der Versuche zur Reproduzierbarkeit bei Kontrolle mittels Schwingquarz für verschieden Solldicken	74

A.10. Vorhandene Korrelationen der Oszillatorparameter für a) SiO ₂ und b) TiO ₂	74
A.11. Relative Schwankungen der optischen Konstanten von a) SiO ₂ , b) Nb ₂ O ₅ , c) Ta ₂ O ₅ und d) TiO ₂	75
A.12. a) Standardabweichungen der gemessenen Dunkelspektren in Abhängigkeit der Wellenlänge und b) Wellenlängenabhängigkeit der relativen Standardabweichung der gemessenen Intensitätsspektren der Lampe (ohne ΔI_{abs})	77
A.13. 30 gemessene Intensitätsspektren der Lampe	78
A.14. Einfache Standardabweichung des Lampenspektrums als Funktion der Wellenlänge	79
B.1. Gemessenes (Punkte) und mittels GenX simuliertes (Linie) Intensitätsspektrum von AR-Design 1	80
B.2. Gemessenes (Punkte) und mittels GenX simuliertes (Linie) Intensitätsspektrum von AR-Design 2	81

Tabellenverzeichnis

2.1. Zusammenfassung der berücksichtigten Effekte im Fall der virtuellen Beschichtungsprozesse	27
3.1. Prozessbedingungen der Experimente zur Untersuchung der Reproduzierbarkeit	33
3.2. Übersicht über die Experimente zur Abscheidung der Demonstratoren	34
3.3. Einstellungen am XRD 3000PTS zur Vermessung der Einzelschichten	39
3.4. Einstellungen am XRD 3000PTS zur Vermessung der beiden Antireflexsysteme	39
4.1. Schichtdicke und rms-Rauheit der mittels XRR vermessenen Einzelschichten	45
4.2. Vergleich simulierter Gutausbeuten in Prozent und erfolgreicher zu durchgeführter Beschichtungsversuche, wobei zur Auswertung nur Experimente herangezogen wurden, welche mittels BBM oder in-situ kalibriertem Schwingquarz kontrolliert wurden.	51
A.1. Schichtdicke und rms-Rauheit der mittels Röntgenreflektometrie vermessenen Einzelschichten	70
A.2. Ergebnisse der Reproduzierbarkeitsversuche: Ausgewerteter Wellenzahlbereich, Mittelwert osz und Standardabweichung Δosz der Oszillatorparameter, sowie Standardabweichung der Schichtdicke Δd für die Soll-dicke d nach Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz.	73
A.3. Schwankungen der Oszillatorparameter auf Grund der zufälligen messbedingten Fehler für SiO_2 und Ta_2O_5	76

1. Einleitung

In der Dünnschichtoptik ist es von ausschlaggebender Bedeutung präzise optische Schichten herzustellen, um den wachsenden Anforderungen der optischen Systeme zu genügen. Trotz der Entwicklung immer genauerer Beschichtungs- und Abscheidemethoden, lassen sich Abscheidefehler nicht vermeiden. Abweichungen von der theoretisch erwarteten spektralen Charakteristik lassen sich unter anderen auf Schwankungen in den Schichtdicken und den optischen Konstanten der verwendeten Materialien zurückführen.

Der wirtschaftliche Aspekt der Verringerung von Produktionskosten und -zeiten ist ein treibender Faktor für die Weiterentwicklung der Dünnschichtfertigung für die Optik. Um dies bei gesteigerter Qualität zu gewährleisten, ist es das Ziel des Projektes Tailored Automated Coating (TACo; Quelle: [TAC]) eine adaptive Fertigungskette für den Beschichtungsprozess zu entwickeln. Zur Verdeutlichung des Unterschiedes zwischen einer konventionellen und der adaptiven Fertigungskette dient Abbildung 1.1.

Für eine vorgegebene Spezifikation lassen oft sich viele mögliche Dünnschichtdesigns finden, deren praktische Realisierbarkeit aber häufig fraglich ist. Im Fall der adaptiven Fertigungskette werden im Vorfeld virtuelle Prozessläufe durchgeführt, um die Designstabilität im Prozess zu untersuchen. Dies dient zur Auswahl von Systemen, welche erfolgversprechend bezüglich der Erfüllung der Spezifikationen sind und eine hohe Prozessstabilität besitzen. Eine Abhandlung zur Bedeutung der Simulation von Beschichtungsprozessen ist in [Tik05] gegeben.

Während des Beschichtungsprozesses werden außerdem in-situ Messverfahren verwendet, um eine fortschrittliche Prozesskontrolle und -analyse zu ermöglichen. Als Beispiel dienen die optische breitbandige Spektroskopie am bewegten Substrat, oder die Messung des Sauerstoffgehalts im Rezipienten. Mit Hilfe der in-situ Messungen lassen sich Aussagen über den Betriebszustand der Beschichtungsanlage und den Verlauf der Beschichtung treffen. Durch Echtzeitanpassung der Prozessparameter ist es

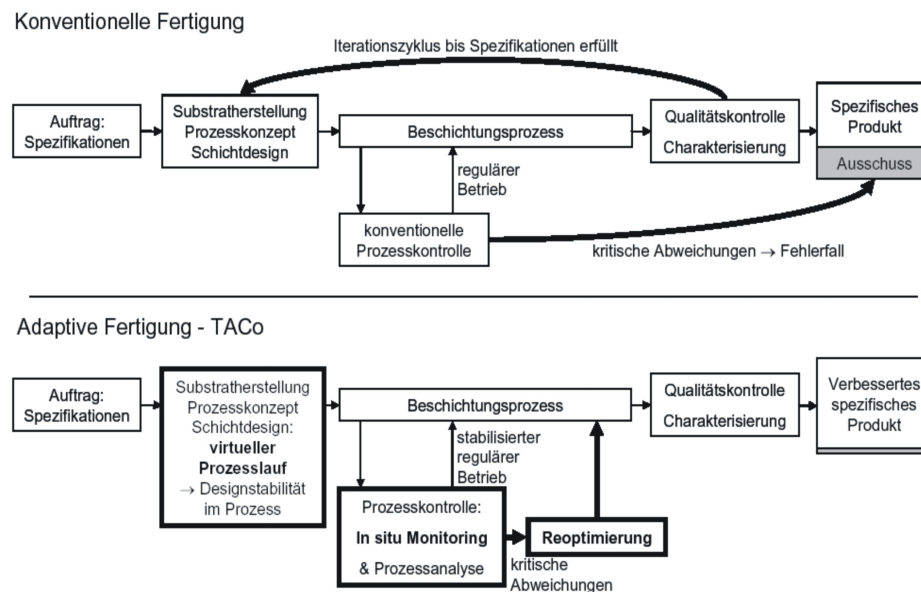


Abbildung 1.1.: Schematische Darstellung des Vergleichs zwischen der adaptiven und einer konventionellen Fertigungskette

möglich, die Prozessstabilität deutlich zu steigern und einen hohen Automatisierungsgrad zu realisieren. Dies dient zur Fehlererkennung und -vermeidung.

Bei der konventionellen Fertigung kommt es immer wieder zu kritischen Abweichungen der realisierten spektralen Charakteristik von der Sollcharakteristik, welche letztlich in Fehlchargen resultieren können. Im Fall der adaptiven Fertigungskette sollen diese Abweichungen rechtzeitig erkannt werden und eine Fehlerkompensation durch Anpassung der verbleibenden Schichtdicken erfolgen. Die Zweckmäßigkeit der Reoptimierung wurde erstmals in [Hol79] beschrieben.

Die drei Komplexe virtuelle Beschichtungen, in-situ Messverfahren und Reoptimierung sollen die sonst benötigten Iterationszyklen bis zur Erfüllung der Spezifikationen vermeiden, um damit eine Reduzierung der Produktionszeiten und -kosten mit sich zu bringen.

Das Ziel dieser Arbeit besteht in der Begründung und Optimierung eines Dünnschichtmodells zur Prognose optischer Eigenschaften oxidischer Beschichtungen zur Realisierung sowohl virtueller als auch realer Beschichtungsprozesse. Im letzteren Fall entscheidet diese Prognose auch über die Durchführung von Reoptimierungsroutinen

während der Beschichtung. Es ist von Interesse, verschiedene Prozessführungsstrategien simulieren zu können, um zu entscheiden, welche Methode zur Beschichtung eines Designs besser geeignet ist. Simulationen der Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz und mit Hilfe des optischen breitbandigen Monitoriersystems OptiMon [Wil08] sollen realisiert werden.

Der Grundgedanke der Modellvorstellung zur Simulation des Beschichtungserfolges findet sich in der Überlegung, die Eigenschaften abzuscheidender Dünnschichtsysteme möglichst realistisch vorausberechnen zu können. Dabei wird auf die Parameter Schichtdicke und komplexe Brechzahl zurück gegriffen. Um mit Hilfe der Simulation eine möglichst realitätsnahe Aussage treffen zu können, ist der Vergleich mit realen Abscheideprozessen nötig. Diese werden in-situ während des Beschichtungsprozesses überwacht und zusätzlich ex-situ vermessen, um die Gegenüberstellung zwischen Experiment und Simulation durchführen zu können.

2. Theoretische und technische Grundlagen

2.1. Grundlagen der Beschreibung von Dünnschichtspektren

2.1.1. Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie

Von dünnen Schichten wird häufig gesprochen, wenn ihre Schichtdicke im Mikro- und Nanometerbereich liegt. Neben beispielsweise der Verbesserung der mechanischen Widerstandsfähigkeit von Oberflächen durch Ausnutzung materialspezifischer Eigenschaften, wird in der Optik auch Nutzen aus der Interferenz gezogen. In diesem Fall spricht man von dünnen Schichten, wenn die Schichtdicke im Bereich der Wellenlänge der zur Untersuchung verwendeten elektromagnetischen Strahlung liegt. Da es sich bei dünnen Schichten eher um zwei dimensionale Gebilde handelt, können sich insbesondere die optischen Eigenschaften von denen der massiven Festkörper des selben Materials unterscheiden.

Durch Messungen der Dünnschichtspektren lassen sich die Charakteristika eines Dünnschichtsystems ermitteln, welche vor allem in zwei Bereiche unterteilt werden können. Eigenschaften, wie zum Beispiel optische Konstanten sind Materialeigenschaften, während Schichtdicken oder Topologie die Geometrie des Systems darstellen.

Aus Untersuchungen der Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit dem Material des Dünnschichtsystems, was schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt ist, lassen sich diese beschriebenen Eigenschaften bestimmen.

Bei elektromagnetischer Strahlung handelt es sich um Transversalwellen, bei denen magnetischer \vec{H} und elektrischer Feldstärkevektor \vec{E} senkrecht aufeinander und senkrecht zur Ausbreitungsrichtung \vec{k}/k stehen. Sie erfüllen die Maxwellgleichungen [Lip97], welche für den Fall fehlender Ladungsdichte ρ und Stromdichte \vec{j} in folgender

Form geschrieben werden:

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad \vec{B} = \mu_0 \cdot (\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.1)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\operatorname{div} \vec{D} = 0 \quad (2.3)$$

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad \vec{D} = \epsilon \cdot \epsilon_0 \cdot \vec{E}. \quad (2.4)$$

\vec{D} und \vec{B} bezeichnen die elektrische und magnetische Induktion, \vec{M} die Magnetisierung und ϵ die dielektrische Funktion des Mediums.

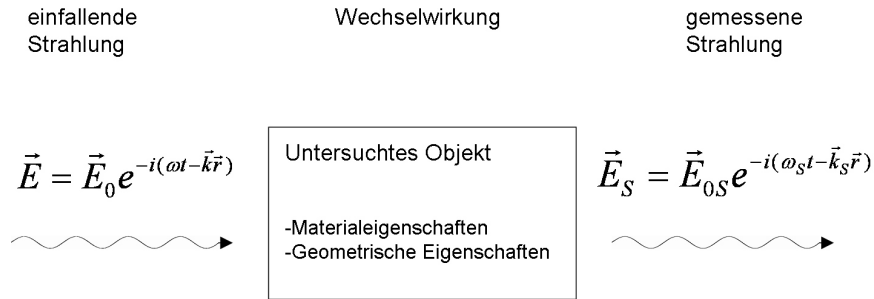


Abbildung 2.1.: Schematische Darstellung der Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung und dem betrachteten Medium

Durch Lösen der Maxwellgleichungen für den Fall eines nicht magnetischen ($\vec{M} = \vec{0}$), isotropen Mediums, erhält man die Wellengleichung unter der Annahme eines eindimensionalen Problems in z -Richtung in der Form

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 \quad \text{mit} \quad \frac{1}{c^2} = \epsilon_0 \mu_0. \quad (2.5)$$

Diese Wellengleichung kann durch eine ebene Welle gelöst werden, welche sich geradlinig in z -Richtung ausbreitet und durch den Ansatz

$$E = E_0 \exp(-i(\omega t - kz)) \quad (2.6)$$

beschrieben wird. Durch Einsetzen von Gleichung (2.6) in Gleichung (2.5) erhält man zusätzlich das Dispersionsgesetz entsprechend Gleichung (2.7). k bezeichnet die z -

Komponente des Wellenvektors, c die Vakuumlichtgeschwindigkeit und ω die Kreisfrequenz.

$$k^2 = \frac{\epsilon \omega^2}{c^2} \quad (2.7)$$

Wie Abbildung 2.1 nahelegt, können sich bei Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie Amplitude und Polarisationszustand der Strahlung ändern, sowie die Ausbreitungsrichtung und die Kreisfrequenz. Dies ist jeweils durch den zusätzlichen Index S gekennzeichnet. Zur Charakterisierung der linearen optischen Materialeigenschaften lassen sich die beiden optischen Konstanten Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient K heranziehen, welche die Wechselwirkung des Lichts mit dem betrachteten Medium beschreiben. Die Definition des Brechungsindex erfolgt über den Quotienten der Phasengeschwindigkeiten im Vakuum und im zu untersuchenden Material, während der Extinktionskoeffizient die Absorption der elektromagnetischen Strahlung in der Materie beschreibt. Beide Parameter lassen sich ausgehend vom Dispersionsgesetz herleiten. Durch Einsetzen von Gleichung (2.7) in (2.6) und der Annahme, dass ϵ eine komplexe Zahl ist, erhält man für die elektrische Feldstärke

$$E = E_0 \exp(-\operatorname{Im}(\sqrt{\epsilon}) \omega z / c) \exp(-i(\omega t - \operatorname{Re}(\sqrt{\epsilon}) \omega z / c)). \quad (2.8)$$

Der erste Exponent beschreibt die Dämpfung der Amplitude, der zweite enthält die Phase der ebenen Welle.

Real- und Imaginärteil des komplexen Brechungsindex \hat{n} werden definiert als:

$$\hat{n} = n + iK \quad \text{mit} \quad n = \operatorname{Re}(\sqrt{\epsilon}) \quad K = \operatorname{Im}(\sqrt{\epsilon}). \quad (2.9)$$

Aus dem Extinktionskoeffizienten K folgt entsprechend Gleichung (2.10) der Absorptionskoeffizient α , welcher Auskunft über die Absorption im Medium gibt. Dieser beschreibt die exponentielle Abnahme der Intensität des Lichts, während dieses sich durch das Material bewegt.

$$\alpha = \frac{2\omega K}{c} \quad (2.10)$$

2.1.2. Das Oszillatormodell

Eine Möglichkeit die Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie zu beschreiben, findet sich im Oszillatormodell [Ste96]. In diesem Modell wird davon ausgegangen, dass die wechselwirkenden Ladungsträger nicht frei beweglich sind.

Wird ein statisches elektrisches Feld angelegt, kommt es zur räumlichen Verschiebung der Ladungsträger, welche anschließend eine neue Gleichgewichtslage einnehmen. Da somit kein konstanter Stromfluss entsteht, muss das Material als Dielektrikum betrachtet werden. Bei Anlegen eines zeitlich veränderlichen harmonischen Feldes hingegen, schwingen die Ladungsträger mit der Ladung q und der Masse m um ihre Gleichgewichtslage. Im Fall geringer Auslenkungen können sie als harmonische Oszillatoren aufgefasst werden.

Für die dielektrische Funktion in Abhängigkeit der Wellenzahl ν , welche nach Gleichung (2.11) über die Wellenlänge λ

$$\omega = 2\pi \frac{c}{\lambda} = 2\pi c\nu \quad (2.11)$$

mit ω verknüpft ist, erhält man unter Annahme des Multioszillatormodells die in Gleichung (2.12) dargestellte Berechnungsvorschrift [Ste96]

$$\epsilon(\nu) = 1 + \sum_{l=1}^N \frac{J_l}{\nu_{0l}^2 - \nu^2 - 2i\nu_l\Gamma_l}, \quad (2.12)$$

mit dem Intensitätsfaktor J_l , der Linienbreite 2Γ und der Resonanzfrequenz ν_0 .

Eine abgewandelte Form der Gleichung (2.12) wird sowohl in der Software [LCa] zur Auswertung der Dünnschichtspektren verwendet, als auch zur Simulation der Beschichtungsprozesse und ist in Gleichung (2.13) angegeben.

$$\epsilon(\nu) = 1 + \sum_{l=1}^N \frac{J_l}{\pi} \left(\frac{1}{\nu_{0l} - \nu - i\Gamma_l} + \frac{1}{\nu_{0l} + \nu + i\Gamma_l} \right) \quad (2.13)$$

Bei der dielektrischen Funktion handelt es sich um eine komplexe Funktion, deren Realteil $\epsilon' = \text{Re}(\epsilon)$ und Imaginärteil $\epsilon'' = \text{Im}(\epsilon)$ als Funktion der Wellenzahl ν in Abbildung 2.2 dargestellt sind. Dies dient zur Verdeutlichung der beschriebenen Oszillatorparameter. Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient K , welche nach Gleichung

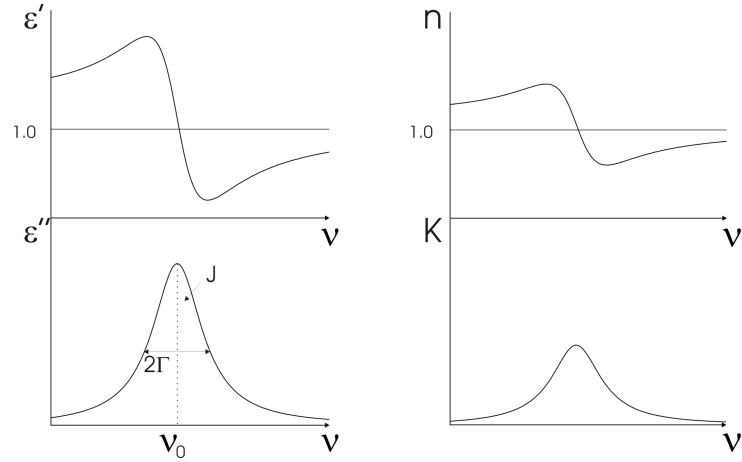


Abbildung 2.2.: Grafische Darstellung von Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktion $\epsilon(\nu) = \epsilon'(\nu) + i\epsilon''(\nu)$ im Vergleich zu den Parametern Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient K als Funktion der Wellenzahl ν

chung (2.9) aus der dielektrischen Funktion berechnet werden, sind zum Vergleich zusätzlich in Abbildung 2.2 veranschaulicht.

2.1.3. Das Dünnschichtspektrum

Bei der Untersuchung von Dünnschichtsystemen mittels elektromagnetischer Strahlung kann die einfallende Strahlung transmittiert, reflektiert, absorbiert und gestreut werden. Da das Transmissionsvermögen T als Intensitätsverhältnis aus transmittierter I_T und einfallender I_E Strahlung definiert ist, was analog für das Reflexionsvermögen R , die Absorption A und die Streuung S gilt, ergibt sich:

$$T + R + A + S = 1. \quad (2.14)$$

Eine elektromagnetische Welle fällt unter dem Winkel ϕ auf eine Grenzfläche, welche für die Berechnung von Transmissions- und Reflexionsvermögen berücksichtigt werden muss. Der reflektierte Strahl tritt unter dem Winkel ϕ aus der Ebene heraus, während der transmittierte Strahl entsprechend dem Brechungsgesetz unter dem Winkel ψ in das Medium gebrochen wird. Die Festlegung des Winkels erfolgt jeweils zwischen dem betrachteten Strahl und dem Lot zur Grenzfläche. Die Transmissions-

und Reflexionskoeffizienten der s und p polarisierten Komponenten der elektischen Feldstärkevektoren lassen sich mit Hilfe der Fresnelschen Formeln [Lip97] beschreiben

$$r_p = \frac{E_p^r}{E_p^i} = \frac{n_2 \cos \phi - n_1 \cos \psi}{n_2 \cos \phi + n_1 \cos \psi} \quad r_s = \frac{E_s^r}{E_s^i} = \frac{n_1 \cos \phi - n_2 \cos \psi}{n_1 \cos \phi + n_2 \cos \psi} \quad (2.15)$$

$$t_p = \frac{E_p^t}{E_p^i} = \frac{2n_1 \cos \phi}{n_2 \cos \phi + n_1 \cos \psi} \quad t_s = \frac{E_s^t}{E_s^i} = \frac{2n_1 \cos \phi}{n_1 \cos \phi + n_2 \cos \psi}. \quad (2.16)$$

Die hochgestellten Indizes i, r und t entsprechen der einfallenden, reflektierten und transmittierten Strahlung.

Betrachtet man nun eine dünne Schicht mit dem komplexen Brechungsindex \hat{n}_2 auf einem quasiunendlich ausgedehnten Substrat mit der Brechzahl n_3 und dem Umgebungsmedium n_1 , so muss die Reflexion an der Grenzfläche zum Substrat berücksichtigt werden. Für die weitere Betrachtung wird vorausgesetzt, dass Streuung vernachlässigbar ist und keine Reflexion an der Rückseite des Substrates auftritt.

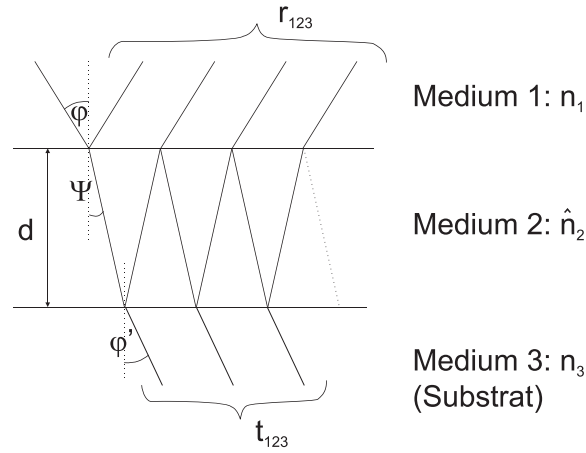


Abbildung 2.3.: Schematische Darstellung von Reflexion und Transmission an einer dünnen Schicht

Wie in Abbildung 2.3 ersichtlich, treten an den beiden Grenzflächen Mehrfachreflexionen auf, was zu den beobachtbaren Interferenzeffekten führt. Nach [Ste96] gilt

für den daraus resultierenden Reflexions- r_{123} und Transmissionskoeffizienten t_{123} :

$$r_{123} = \frac{r_{12} + r_{23} \exp(2i\beta)}{1 - r_{21}r_{23} \exp(2i\beta)} \quad (2.17)$$

$$t_{123} = \frac{t_{12}t_{23} \exp(i\beta)}{1 - r_{21}r_{23} \exp(2i\beta)}. \quad (2.18)$$

Der Phasenunterschied β , dessen Ursache in dem zurückgelegten Weg der Strahlung unter dem Einfallswinkel ϕ durch die Schicht mit Schichtdicke d liegt, lässt sich folgendermaßen ermitteln

$$\beta = 2\pi\nu d \sqrt{\hat{n}_2^2 - \sin^2 \phi}. \quad (2.19)$$

Ausgehend von den Gleichungen (2.17) und (2.18), berechnet sich das Reflexions- und Transmissionsvermögen des Systems entsprechend Gleichung (2.20).

$$R = |r_{123}|^2 \quad T = \frac{n_3 \cos \phi'}{n_1 \cos \phi} |t_{123}|^2 \quad (2.20)$$

Aus dem beobachtbaren Interferenzmuster lassen sich Informationen zu Schichtdicke und den optischen Konstanten der dünnen Schicht erhalten. Entspricht die optische Dicke nd der betrachteten Schicht einem ganzzahligen Vielfachen der halben Wellenlänge der einfallenden Strahlung, so spricht man von einer $\lambda/2$ -Schicht. Da in diesem Fall $\cos(2\beta)$ den Wert 1 annimmt, folgt für das Transmissionsvermögen

$$T = \frac{4n_1n_3}{(n_1 + n_3)^2}, \quad (2.21)$$

welches identisch ist mit dem unbeschichteten Substrat. Die Schicht ist optisch unwirksam.

Vergleicht man das Transmissionsspektrum des reinen und des beschichteten Substrates, so treten außerhalb der $\lambda/2$ -Stellen Abweichungen beider Spektren auf, wie sie in Abbildung 2.4 zu sehen sind. In den beiden Fälle $n_1 < n_2 < n_3$ und $n_1 > n_2 > n_3$ ist das Transmissionsvermögen des beschichteten Substrates größer gleich das des unbeschichteten. Man spricht von einer entspiegelnden Schicht. Um eine verspiegelnde Schicht hingegen handelt es sich, wenn $n_1 < n_2 > n_3$ gilt. In beiden Fällen entspricht die optische Dicke in den Extrempunkten, welche nicht mit dem Transmissionsvermögen des unbeschichteten Substrates zusammenfallen, dem ungeradzahligen Vielfachen

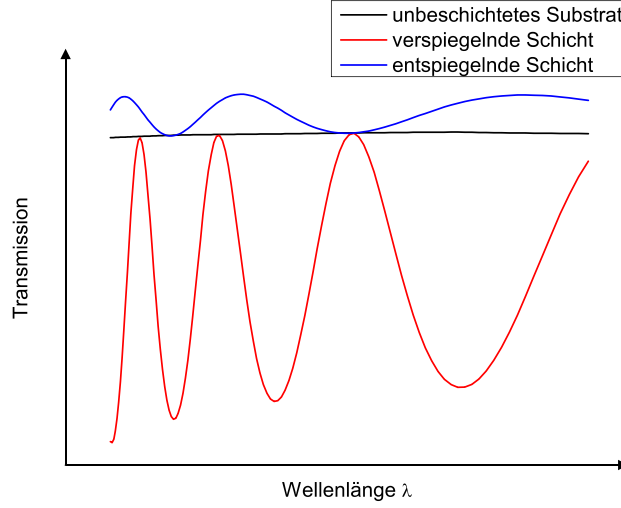


Abbildung 2.4.: Transmissionsspektren im Vergleich: Unbeschichtetes Substrat, verspiegelnde und entspiegelnde Schicht

von $\lambda/4$. Für das Transmissionsvermögen erhält man auf Grund von $\cos(2\beta) = -1$

$$T = \frac{4n_1n_2^2n_3}{(n_1n_3 + n_2^2)^2}. \quad (2.22)$$

Von besonderem Interesse ist hierbei der Fall $n_2 = \sqrt{n_1n_3}$. Das Transmissionsvermögen würde theoretisch den Wert 1 annehmen, was zum Verschwinden des Reflexionsvermögens führen würde.

Aus den Extrempunkten der Transmission lässt sich die Schichtdicke der dünnen Schicht berechnen. Werden zum Beispiel Interferenzextrema bei senkrechtem Lichteinfall und unter Vernachlässigung von Dispersion und Absorption betrachtet, so treten Extrempunkte der j -ten Ordnung dann auf, wenn $\cos(2\beta) = \pm 1$. Die Beziehung zwischen der Wellenzahl ν_j des Extrempunktes und der Schichtdicke d lässt sich beschreiben durch [Ste96]:

$$\nu_j = \frac{j}{4n_2d} \quad \text{mit} \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (2.23)$$

2.2. Stand von Wissenschaft und Technik

2.2.1. Allgemeine Entwicklung

Mit der wachsenden Bedeutung der Präzisionsoptik gewinnt die Entwicklung von Abscheidetechnologien für qualitativ hochwertige Beschichtungen massiv an Relevanz. Diese Technologien beinhalten dabei sowohl die Abscheidetechnik, als auch die Kontrollmethoden, mit denen die Beschichtung durchgeführt wird.

Neben der weit verbreiteten Verwendung des Schwingquarzes [Mac81],[Laa77] zur Prozesskontrolle durch Messung der Schichtdicke des aufgedampften Materials, werden vermehrt verschiedene optische Kontrollen [Wil02] eingesetzt. Diese sind auf Grund der hohen Genauigkeit sehr vielversprechend [Zoe05a],[Zoe05b] und können zusätzlich Möglichkeiten zur Fehlerkompensation besitzen [Vid78]. Bei den spektralphotometrischen Kontrollen wird das Spektrum der Probe in-situ gemessen (Transmission und/oder Reflexion), woraus bei Kenntnis der optischen Konstanten die Schichtdicke berechnet werden kann.

Beim Aufdampfen von Schichtsystemen treten stets auf Grund zufälliger und systematischer Fehler Abweichungen vom theoretisch erwarteten Design auf, was zu Fehlchargen führen kann. Deshalb wurden bereits seit den 70er Jahren des letzten Jahrhunderts Programme zur Simulation von Beschichtungsprozessen entwickelt. Erste Modelle und Simulationsergebnisse wurden von Dobrowolski [Dob76] und Holm [Hol79] veröffentlicht. Auf Grund steigender Rechenleistung ist es möglich immer komplexere Systeme zu simulieren und die Rechenzeit weiter zu verkürzen. Auch die verwendeten Modelle entwickeln sich stetig weiter, wodurch die virtuellen Beschichtungen die Realität immer besser darstellen können. Die computergestützten Verfahren haben sich somit zu einem sehr wertvollen Instrument entwickelt, welche nicht nur die Auswahl geeigneter Designs erlauben, sondern auch die Optimierung der Kontrollstrategie. Sie schaffen somit eine Verbindung zwischen Design und Produktion [Tik05].

Die Möglichkeit Erfolgsaussichten zu simulieren und damit Informationen zur Herstellbarkeit zu gewinnen, wird nicht nur in der Beschichtungstechnik eingesetzt, sondern findet auch in vielen anderen industriellen Bereichen [Azi05],[Lan00] Anwendung.

2.2.2. Stand der Technik

2.2.2.1. Hochvakuumbedampfungsanlage SYRUSpro 1100

Zunächst erfolgt die Vorstellung der verwendeten Beschichtungsanlage. Es handelt sich um die Hochvakuumbedampfungsanlage SYRUSpro 1100 der Firma Leybold, deren Aufbau in Abbildung 2.5 dargestellt ist.

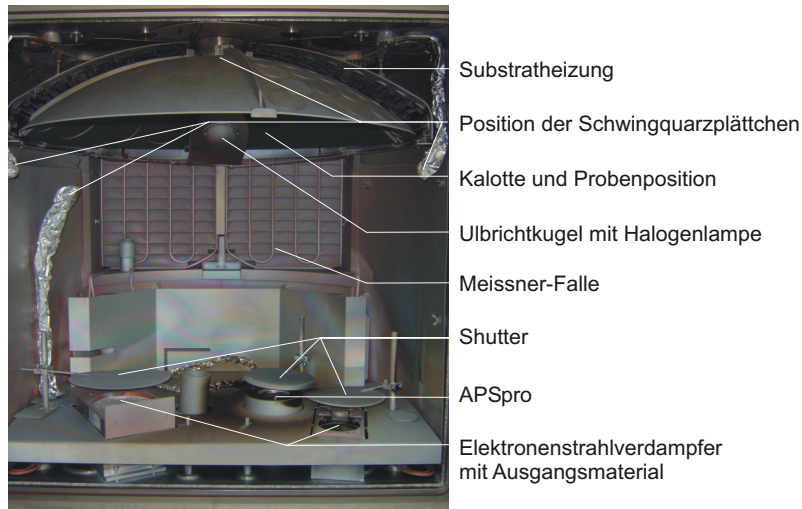


Abbildung 2.5.: Hochvakuumbeschichtungsanlage SYRUSpro 1100

Eine Vakuumpumpenkombination aus Drehschieber- und Rootspumpe, sowie einer Kryopumpe wird zur Erzeugung des Hochvakuum in der Prozesskammer eingesetzt. Da der Großteil des verbleibenden Restgases bei Hochvakuum aus Wasserdampf besteht, befindet sich zusätzlich eine Meissner-Falle in der Anlage. Die Beschichtung kann mit Hilfe von zwei Elektronenstrahlverdampfungsquellen (HPE 6 (rechts), HPE 10 (links)) [SYR] durchgeführt werden. Des Weiteren befindet sich in der Prozesskammer eine Plasmaquelle (APSPRO - Advanced Plasma Source [SYR]), wie in Abbildung 2.5 zu sehen. Sie besteht aus einem zylinderförmigen Metallgefäß, welches als Anode dient, sowie einer indirekt geheizten LaB₆-Kathode. Die APSPRO wird zur Reinigung der Substratoberfläche vor dem Beschichtungsprozess verwendet, in dem Atome durch Ionenbeschuss abgetragen und anschließend abgepumpt werden können. Zusätzlich dient sie zur Unterstützung des Beschichtungsprozesses. Die aufwachsende Schicht wird verdichtet und Reaktivgase werden dissoziiert, welche zum

Schichtwachstum beitragen. Der beim Verdampfen aufgespaltete Sauerstoff und das Defizit im Ausgangsmaterial werden durch kontinuierlichen O_2 -Einlass kompensiert. Der mit einem Drehantrieb versehene Substrathalter besteht aus einer Kalotte mit kreisförmigen Aussparungen für die Substrate. Die Rotation sorgt für eine gleichmäßige Schichtdicke über den gesamten Substratdurchmesser und bei geeignet gewählter Verteilungsblende über die gesamte Kalotte. Mit Hilfe der sich über der APSpro und den Elektronenstrahlverdampfern befindlichen Shutter ist es möglich, gezielt sowohl den Beschichtungsprozess, als auch die Wirkung des Plasmas unterbrechen zu können.

Die Schichtdickenbestimmung mittels Schwingquarz erfolgt über die Messung der Oszillatorfrequenz des Schwingquarzes, welcher zu Schwingungen im Bereich 6 MHz angeregt wird. Abhängig von den physikalischen Eigenschaften des Beschichtungsmaterials und dem Wachstum der Schichtdicke verringert sich die Oszillatorfrequenz. Bei Kenntnis der Eigenschaften des Ausgangsmaterials lässt sich ausgehend von der Oszillatorfrequenz die Schichtdicke bestimmen. Wird die Solldicke überschritten, kommt es zum Abbruch des Verdampfungsprozesses.

Abbildung 2.5 zeigt die Positionen der Schwingquarzplättchen in der Vakuumkammer, woran erkennbar ist, dass alle Positionen von der Substratposition mehr oder weniger abweichen. Die Massebelegung am verwendeten Schwingquarz und des zu beschichtenden Substrates ist abhängig von der Form der Verdampfungskeule. Diese Abhängigkeit wird über den Toolingfaktor beschrieben und kann durch Kalibriermessungen bestimmt werden.

2.2.2.2. Optisches breitbandiges Monitoriersystem (BBM) OptiMon

Die Ermittlung der Schichtdicke mittels OptiMon [Wil08] erfolgt über in-situ Messung der Intensitätsspektren von Lichtquelle und Probe. In Abbildung 2.6 ist eine schematische Darstellung des Monitoriersystems abgebildet. Als Lichtquelle wird eine Halogenlampe verwendet, welche sich in einer Ulbrichtkugel befindet. Die Ulbrichtkugel ist integriert in die Dampfschattenblende. Diese dient zur Abschattung des Lichts von Plasmaquelle und der Elektronenstrahlverdampfer, sowie zum Schutz der Beleuchtungsoptik vor Beschichtung mit den verwendeten Ausgangsmaterial.

Die Messung der Intensitätsspektren erfolgt über einen CCD-Detektor [Jet], welcher sich außerhalb der Vakuumkammer befindet. Der mittels der OptiMon-Software nutz-

bare Spektralbereich von 400 nm bis 920 nm entspricht folglich nahezu senkrechtem Lichteinfall.

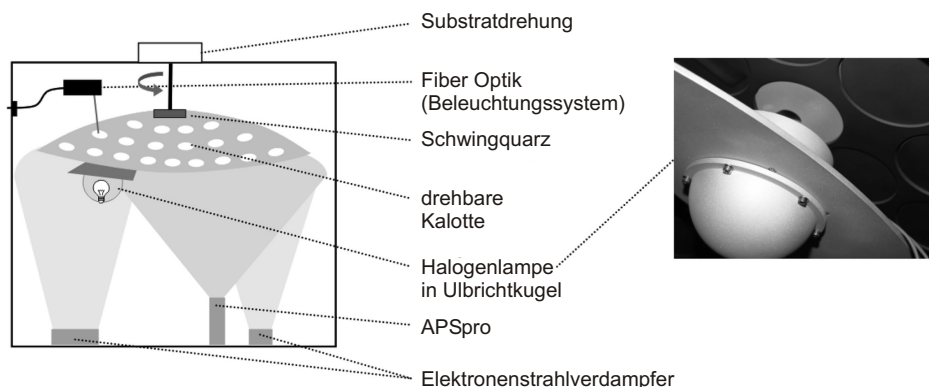


Abbildung 2.6.: Implementierung des breitband optischen Monitoringsystems Opti-Mon in der SYRUSpro 1100

Als Quotient aus dem gemessenen Proben- und Lampenintensitätsspektrum ergibt sich das Transmissionsspektrum. Für das zu beschichtende System kann unter Verwendung vorgegebener optischer Konstanten die Schichtdicke ermittelt werden. Dazu wird ein von A.V. Tikhonravov und M.K. Trubetskov bereitgestellter sequentieller Algorithmus [Tikb],[Tik04] herangezogen. Die optischen Konstanten, sowie die ermittelten Schichtdicken der bereits abgeschiedenen Schichten werden als konstant angesehen. Durch Variation der physikalischen Dicke der aktuellen Schicht wird die Abweichung zwischen gemessenem und ausgehend von den vorgegebenen optischen Konstanten modelliertem Transmissionsspektrum minimiert. Das Beenden des Abscheideprozesses erfolgt nach Überschreiten der vorgegebenen Solldicke.

Während der Bedampfungspause werden Transmissionspektren gemessen und der daraus erhaltene Mittelwert für eine genauere Schichtdickenbestimmung herangezogen. Mit Hilfe des von A.V. Tikhonravov und M.K. Trubetskov bereitgestellten triangularen Algorithmus [Tik04] werden alle physikalischen Dicken der abgeschiedenen Schichten neu ermittelt. Die Schichtdicken werden unter konstant angenommenen optischen Konstanten solange variiert bis auch bei diesem Algorithmus die Abweichung zwischen gemessenem und modelliertem Spektrum minimal wird.

2.2.3. Abweichung vom homogenen/isotropen Schichtmodell mit glatten Grenzflächen

2.2.3.1. Rauheit

Bei der theoretischen Beschreibung von Einzelschichten oder Schichtsystemen werden meist glatte Schichten angenommen. In der Praxis ist jedoch leicht ersichtlich, dass Oberflächen und Grenzflächen von Schichten rau sind und dieser Effekt unter Umständen bei der Modellierung und Charakterisierung von Spektren berücksichtigt werden muss. In Artikel [Tik03] ist der Einfluss auf die Streuung dargestellt, unter Verwendung von zwei festgelegten Parametern (large-scale Rauheit, small-scale Rauheit), welche bezüglich ihrer Relation zur Wellenlänge unterschieden werden. Ausgehend von der exakten elektrodynamischen Theorie werden in diesem Artikel Gleichungen zur Berechnung von Reflexion und Transmission hergeleitet.

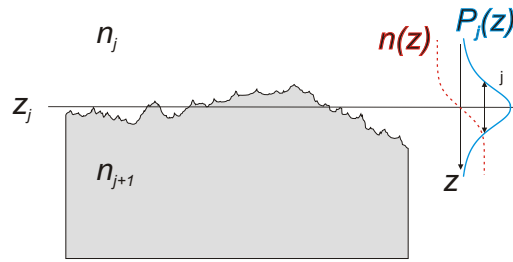


Abbildung 2.7.: Schematische Darstellung einer rauen Grenzfläche, beschrieben durch Fluktuationen im Höhenprofil $z(x)$ entsprechend einer Dichteverteilung $P_j(z)$

Die Rauheit der Grenzflächen und Oberflächen lässt sich mittels Röntgenreflektometrie ermitteln [Tol99], was schematisch in Abbildung 2.8 dargestellt ist.

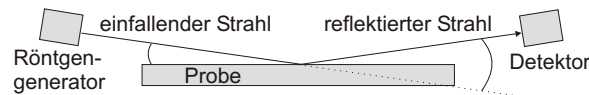


Abbildung 2.8.: Schematische Darstellung der Röntgenreflektometriemessungen

Betrachtet man eine raue Oberfläche, wie sie in Abbildung 2.7 schematisch dargestellt ist, so ergeben sich Schwankungen im Höhenprofil $z(x)$, welche durch die Dichteverteilung $P_j(z)$ beschrieben werden können, mit Mittelwert

$$\mu_j = \int z P_j(z) dz \quad (2.24)$$

und der rms-Rauheit (rms=root-mean-square) σ_j .

$$\sigma_j^2 = \int (z - \mu_j)^2 P_j(z) dz \quad (2.25)$$

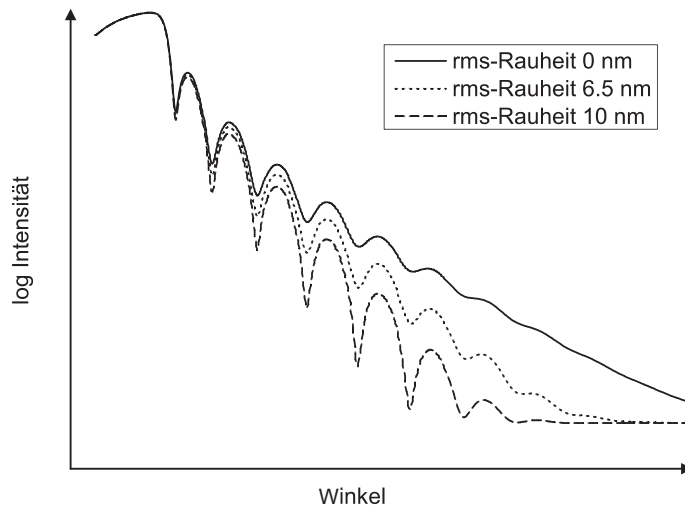


Abbildung 2.9.: Intensität als Funktion des Winkels Θ zwischen Oberfläche und Röntgenstrahl für verschiedene rms-Rauheiten im Fall der Röntgenreflektometrie

Für das Reflexionsvermögen folgt eine Abhängigkeit vom Einfallswinkel, welche exponentiell auf Grund der rms-Rauheit abnimmt. Um dies zu verdeutlichen, zeigt Abbildung 2.9 die Intensität der reflektierten Röntgenstrahlung als Funktion des Winkels Θ zwischen der Oberfläche und des Röntgenstrahls für verschiedene rms-Rauheiten. Man erkennt, dass mit Erhöhung der Rauheit die exponentielle Abnahme der dargestellten Kurven deutlicher wird. Die beobachtbaren Oszillationen sind Interferenzeffekte der reflektierten Strahlen der Grenzflächen und geben Aufschluss über die phy-

sikalische Dicke der aufgedampfen Schicht. Entsprechend der Periode $\Delta\Theta = \Theta_j - \Theta_i$ lässt sich die Schichtdicke nach Gleichung (2.26) abschätzen.

$$d = \frac{2\pi}{2k(\sin\Theta_j - \sin\Theta_i)} \approx \frac{\lambda}{2\Delta\Theta} \quad (2.26)$$

Die Rauheit selbst ergibt sich aus der überlagerten exponentiellen Abhängigkeit.

2.2.3.2. Inhomogenität des Brechzahlprofils

Inhomogenitäten im Brechzahlprofil ($n = n(z)$) sind häufig auftretende Effekte, welche nicht nur Einfluss auf die spektrale Charakteristik besitzen, sondern zusätzlich die Genauigkeit der Abscheidung mittels eines optischen Monitoriersystems beeinträchtigen.

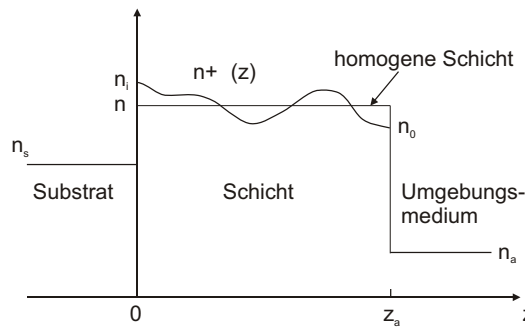


Abbildung 2.10.: Schematische Darstellung eines inhomogenen Brechzahlprofils

Aus dem Brechzahlprofil einer inhomogenen Schicht, wie sie in Abbildung 2.10 dargestellt ist und durch die Gleichung [Tik97]

$$n(z) = \langle n \rangle + \eta(z) \quad (2.27)$$

beschrieben wird, lässt sich die zugehörige spektrale Charakteristik berechnen. In Artikel [Tik97] werden vereinfachte Gleichungen hergeleitet, um Transmission und Reflexion ausgehend vom Verlauf des Brechungsindex berechnen zu können.

Die Bestimmung des Brechzahlprofils ausgehend von Reflexions- oder Transmissionsspektren ist hingegen nicht eindeutig. Dies wurde in den Artikeln [Tik97] und

[Tik93] beschrieben. Es lassen sich verschiedene Inhomogenitäten finden, welche die selbe spektrale Charakteristik aufweisen.

Der Einfluss von Inhomogenitäten auf die Messgenauigkeit des optischen Monitoringsystems wurde in [Bor81] behandelt. Das einwandfreie Funktionieren eines solchen Systems setzt die Kenntnis zuverlässiger Werte für den Brechungsindex voraus. Bei Abweichungen des angenommenen Brechungsindex vom tatsächlichen führt dies zu einem falschen Abschaltzeitpunkt, verbunden mit einer deutlichen Diskrepanz zwischen dem theoretisch erwarteten und dem abgeschiedenen Design. Im Fall des während dieser Arbeit verwendeten optischen Monitoringsystems werden homogene Schichten vorausgesetzt. Mögliche Inhomogenitäten in den Schichten können somit systematische Abweichungen in den abzuschiedenden Systemen hervorrufen.

In dieser Arbeit wird ausgenutzt, dass es durch geeignete Auswahl der Prozessbedingungen möglich ist Inhomogenitäten zu minimieren, so dass diese im Modell vernachlässigt werden können.

2.2.3.3. Thermischer Shift und Vakuum-Luft-Shift

Schichten, welche bei Prozesstemperatur in-situ gemessen werden, können bezüglich ihrer Transmissions- und Reflexionsspektren von Messungen unter Luft bei Raumtemperatur abweichen. Diese Diskrepanz zeigt sich in einem Shift der Spektren bezogen auf die Wellenlänge, was schematisch in Abbildung 2.11 dargestellt ist.

Der betrachtete Effekt kann auf das Zusammenspiel mehrerer Ursachen zurückgeführt werden, wobei im Modell zwei Mechanismen herangezogen werden. Zum einen der thermische Shift, welcher bei Temperaturänderung auftritt und zum anderen der Vakuum-Luft-Shift, bei unterschiedlichen Eigenschaften des Umgebungsmediums. In beiden Fällen verursacht die Änderung der optischen Dicke nd den beschriebenen Shift, welcher im Folgenden über Gleichung (2.28) definiert wird.

$$Shift \equiv \frac{\Delta(nd)}{nd} \cdot 100\% = \frac{\Delta n}{n} \cdot 100\% + \frac{\Delta d}{d} \cdot 100\% \quad (2.28)$$

Die Abweichung der Schichtdicke lässt sich über die thermische Ausdehnung des Materials bei Temperaturerhöhung erklären. Führt man einem Material Wärme zu, in dem man die Umgebungstemperatur um den Betrag ΔT erhöht, so ändert sich die geometrische Schichtdicke entsprechend Gleichung (2.29) um den Faktor Δd , wo-

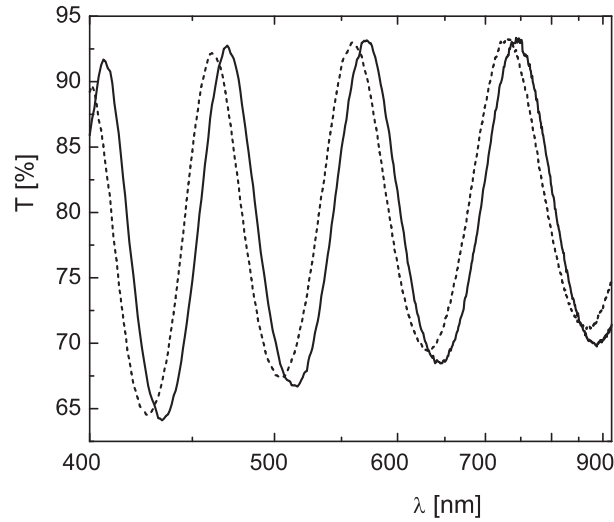


Abbildung 2.11.: Transmissionsspektren einer porösen Nb_2O_5 -Einzelschicht in-situ gemessen (Striche) und unter Luft bei Raumtemperatur (Linie); Shift = -2,0% [Ste09b].

bei d_0 die Schichtdicke zu Beginn der Temperaturerhöhung bezeichnet und α den materialabhängigen Längenausdehnungskoeffizienten.

$$\Delta d = d_0 \cdot \alpha \cdot \Delta T. \quad (2.29)$$

Zur Beschreibung der Brechungsindexänderung Δn soll das Modell von Poren mit Durchmessern im Nanometerbereich in optischen Schichten herangezogen werden [Ste09a]. Betrachtet man eine dünne Schicht, wie sie in Abbildung 2.12 zu sehen ist, ist diese mit Poren durchzogen. Dabei kann man zwei Arten unterscheiden: geschlossene und offene Poren, welche entsprechend ihrem Kontakt zur Oberfläche definiert sind.

Befindet sich die Probe unter Luft bei Raumtemperatur, dann wird angenommen, dass offene Poren mit Wasser gefüllt sind, was einen Brechungsindex von $n = 1.33$ entspricht. Unter Vakuum oder bei 100° Umgebungstemperatur sind die offenen Poren leer, verbunden mit einem Brechungsindex von $n = 1.0$. Geschlossene Poren tragen nicht zur Änderung des Brechungsindex bei, da diese keinen Kontakt zur Oberfläche besitzen ($n = 1$). Sie haben somit keinen Einfluss auf den Shift.

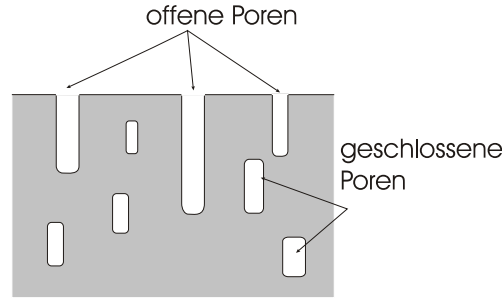


Abbildung 2.12.: Modellsystem einer dünnen Schicht mit Poren

Die dielektrische Funktion ϵ unter Berücksichtigung offener und geschlossener Poren lässt sich folgendermaßen berechnen [Ste09a]

$$(n + iK)^2 = \epsilon = \frac{p\epsilon_0^2 + (2 + p)\epsilon_0\epsilon_2}{(2 + p)\epsilon_0 + p\epsilon_2}. \quad (2.30)$$

ϵ_0 ist die dielektrische Funktion des Bereiches, welcher das Schichtmaterial und die geschlossenen Poren zusammenfasst und mit dem Anteil p in der Schicht vertreten ist. Die Poren mit der dielektrischen Funktion ϵ_2 befinden sich zu einem Anteil von $1 - p$ in der Schicht.

In [Wil08] erfolgt eine Vorstellung von Messungen des Vakuum-Luft-Shifts für Ta_2O_5 -Einzelschichten im Vergleich zwischen ungestützter und plasmagestützter Abscheidung. Anhand dieser Messungen ist ersichtlich, dass bei plasmagestützter Abscheidung der Shift innerhalb der Messungenauigkeit liegt.

2.3. Ursache von Fehlern in Schichtdicken und Materialgrößen

2.3.1. Schwankungen in den optischen Konstanten

Wird ein vorgegebenes Design abgeschieden, so kommt es stets zu Abweichungen zwischen gemessenem und theoretisch erwartetem Spektrum. Eine der Ursachen für diesen Effekt findet sich in der Abweichung der optischen Konstanten von den im theo-

retischen Design vorausgesetzten. Der Einfluss von Schwankungen in den optischen Konstanten wurde in [Bad07] und in [Tik07] am Beispiel von hochbrechenden Schichten untersucht, wo in beiden Fällen nur Variationen im Brechungsindex, jedoch nicht im Extinktionsindex betrachtet wurden. In den meisten Fällen wird auf normalverteilte Zufallszahlen als Brechungsindex zurückgegriffen [Tik07], oder auf gaußverteilte Parameter, welche zur Berechnung des Brechungsindex [Bad07] herangezogen werden.

Trotz kontrollierter Prozessparameter, sind Schwankungen der betrachteten Parameter nicht nur zwischen verschiedenen Chargen beobachtbar, sondern auch während eines Beschichtungsprozesses. Variationen der Prozessparameter haben Einfluss auf den Kondensationsvorgang und auf die Mikrostruktur [Tho82], wie zum Beispiel die Inhomogenität, Porosität des Materials oder Interdiffusion zwischen den Schichten [Sul92].

Schwankungen in den optischen Konstanten können unter anderem auf Variationen der Parameter Abscheiderate, Temperatur, sowie Druck und Richtung des Teilchenstroms des aufzudampfenden Materials zurückgeführt werden. Eine detaillierte Auflistung möglicher Ursachen und deren Wirkung ist in [Tho82] gegeben.

2.3.2. Schichtdickenfehler bei Schwingquarzabscheidung

Bei Beschichtungsversuchen ist die verwendete Abscheidestrategie ausschlaggebend für die Genauigkeit, mit der die vorgegebenen Schichtdicken erreicht und vor allen reproduziert werden können. Zunächst wird auf die Monitorierung mittels Schwingquarz eingegangen.

Ursachen für Schwankungen in der Schichtdicke finden sich zahlreich. Die Qualität der Kalibrierung ist entscheidend für eine hohe Reproduzierbarkeit der physikalischen Dicke. Eine instabile Abscheiderate [Tik07] oder eine Veränderung des Abscheidekegels während der Beschichtung [Bad07] können zu einer Abweichung zwischen gemessener und tatsächlich auf dem Substrat aufgebracht Schichtdicke führen. Ein zusätzlicher Effekt findet sich in der Shutterreaktionszeit, welche sowohl systematischer (Schichtdickenzuwachs) als auch zufälliger Natur sein können (statistische Schwankungen). Des Weiteren verursacht ein möglicher Temperaturunterschied zwischen Schwingquarz und Substrat [Mac81] Fehler, was auf die Temperaturabhängigkeit der Oszillatorfrequenz des Schwingquarzes zurückzuführen ist. Eine mögliche Nichtlinearität zwischen Dicke und Frequenzshift des Schwingquarzes kann Fehler in

der Bestimmung der Schichtdicke verursachen [Bad07], wenn dieser Effekt nicht berücksichtigt wird.

Die Schwankungen in der physikalischen Dicke können normalverteilt beschrieben werden mit Mittelwert und materialspezifischer Standardabweichung, wie es in vielen Veröffentlichungen angenommen wird [Bad07],[Mac81].

2.3.3. Schichtdickenschwankungen im Fall optischer Kontrolle am bewegten Substrat

Auch im Fall der BBM treten bei Untersuchungen zur Reproduzierbarkeit Schwankungen in der Schichtdicke auf. Vergleicht man die Ursprünge der Fluktuationen mit denen bei Schwingquarzkontrolle, so findet man neben einigen kontrollspezifischen Ursachen auch eine Reihe an Gründen, die in beiden Fällen Schwankungen hervorrufen.

Analog der Kontrolle mit Schwingquarz lassen sich Fehlerursachen in Shutterreaktionszeiten finden, sowie in einer instabilen Abscheiderate. Bei optischer Kontrolle beeinflussen zusätzlich Schwankungen im Messsignal die Genauigkeit der Schichtdickenbestimmung. Dabei kann davon ausgegangen werden, dass die Variationen des Messsignals normalverteilt sind [Tik07] und unabhängig vom Beschichtungszeitpunkt und dem verwendeten Material betrachtet werden können [Tik06]. Die Fluktuationen selbst können unterteilt werden in additives (statistische Fluktuationen des Detektorsignals) und multiplikatives Rauschen (intensitätsabhängige Schwankungen) [Bad07].

Zur Berechnung der Schichtdicke aus den in-situ gemessenen Transmissionsspektren wird ein Satz an theoretisch erwarteten optischen Konstanten verwendet. Weichen Brechungsindex und Extinktionskoeffizient der tatsächlich abgeschiedenen Schicht von diesen Werten ab, können neben den bereits erwähnten Schwankungen des Detektorsignals zusätzlich Fehler bei der Bestimmung der physikalischen Dicke auftreten.

Im Gegensatz zur Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz treten bei BBM Effekte der Fehlerfortpflanzung auf [Tik06]. Fehler in bereits vollständig abgeschiedenen Schichten beeinflussen den Abschaltzeitpunkt der aktuellen Schicht.

2.4. Computergestützte Simulation des Beschichtungsprozesses: Erste Modellvorstellung

2.4.1. Systematische und zufällige Fehler

Beschichtungsprozesse sind stets mit Abscheidefehlern behaftet, welche sich in systematische und zufällige Fehler unterscheiden lassen. Sie können nicht nur zu Abweichungen vom gewünschten Design, sondern unter Umständen zur Fehlfunktion des optischen Kontrollsystems führen [Sul92]. In den meisten Fällen ist der Einfluss systematischer Fehler am größten [Tik06].

Trotz der Wirkung systematischer Fehler, werden im begründeten Dünnschichtmodell nur zufällige Fehler betrachtet, da sich systematische Abweichungen durch präzise Kalibrierung oder mit Hilfe von Vorversuchen bestimmen lassen. Im Allgemeinen kann davon ausgegangen werden, dass die Möglichkeit besteht, systematische Abweichungen bestimmen zu können und somit im Modell und der Simulation vorzuhalten.

Mit Hilfe des Modells soll eine zuverlässige und realistische Beschreibung von prozestypischen Schwankungen ermöglicht werden, wobei Fluktuationen in der Schichtdicke und den optischen Konstanten berücksichtigt werden. Zusätzlich wird der Einfluss des thermischen und des Vakuum-Luft-Shift einbezogen.

Es wird vorausgesetzt, dass nur homogene und glatte Schichten mit dem Dünnschichtmodell beschrieben werden, so dass Inhomogenitäten im Brechzahlprofil und Rauheiten der Ober- und Grenzflächen vernachlässigbar sind.

2.4.2. Schwankungen der optischen Konstanten

Fluktuationen in den Prozessparametern verursachen Schwankungen in den optischen Konstanten, die mittels Untersuchungen zur Reproduzierbarkeit quantifiziert werden können.

Auf Grund der Kramers-Kronig-Konsistenz [Lan74] von Brechungsindex und Extinktionskoeffizient, werden diese abhängig voneinander betrachtet. Die Beschreibung erfolgt über das Oszillatormodell, wobei die Oszillatorparameter normalverteilt angenommen werden, mit prozess- und materialspezifischem Mittelwert und Standardabweichung.

Eine einfache Korrelationsanalyse berücksichtigt mögliche Abhängigkeiten zwischen den betrachteten normalverteilten Oszillatorparametern. In Abbildung 2.13 sind zum

Vergleich korrelierte und unkorrelierte Oszillatorparameter für TiO₂-Einzelschichten dargestellt. Im Falle unkorrelierter Parameter werden beide Oszillatorparameter unabhängig von einander mit einer apodisierten Gaußverteilung beschrieben, um statistische Ausreißer zu vermeiden. Das bedeutet, nur Parameter mit Abweichungen vom Mittelwert kleiner gleich das Vierfache der Standardabweichung werden zugelassen. Bei Überschreiten dieser Abweichung wird die Zufallszahl erneut ermittelt.

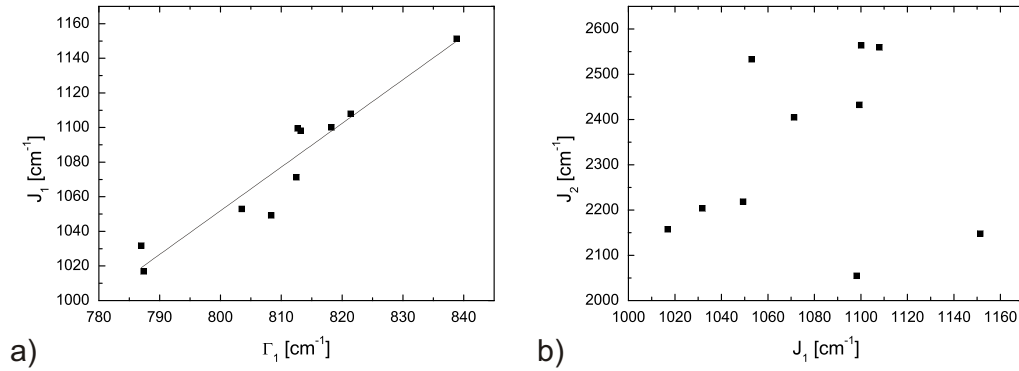


Abbildung 2.13.: Vergleich a) korrelierter und b) unkorrelierter Oszillatorparameter an TiO₂-Einzelschichten. Formelzeichen gemäß Gleichung (2.13).

Bei abhängigen Oszillatorparametern kann die Korrelation durch eine Regressionsgerade wiedergegeben werden, wobei die statistischen Schwankungen um die Gerade durch apodisiert gaußverteilte Regressionsparameter beschrieben werden. Gleichung (2.31) beschreibt allgemein eine Regressionsgerade für die korrelierten Oszillatorparameter A und B . α und β bezeichnen die Parameter der linearen Funktion und $\Delta\alpha$ und $\Delta\beta$ die zugehörigen Standardabweichungen.

$$A(B) = (\alpha + \Delta\alpha)\text{cm}^{-1} + (\beta + \Delta\beta) \cdot B \quad (2.31)$$

Ausgehend von den ermittelten Oszillatorparametern werden die optischen Konstanten entsprechend Gleichung (2.13) berechnet, welche die dielektrische Funktion in Abhängigkeit der Wellenzahl ν angibt. Brechungsindex n und Extinktionskoeffizient K erhält man anschließend über Gleichung (2.9).

Die Fluktuationen der optischen Konstanten sind nur abhängig von der Abscheidemethode, aber nicht vom Kontrollsystem. Damit verbunden gilt die Beschreibung

der optischen Konstanten sowohl für Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz, als auch für optische breitbandige Monitorierung.

2.4.3. Abweichung der Schichtdicke vom Sollwert im Fall der Schichtdickenkontrolle mit Schwingquarz

Während dieser Arbeit wurden Beschichtungsexperimente durchgeführt, welche besonders von zwei Fehlerquellen beeinflusst werden, der Shutterreaktionszeit und dem Drift des Toolingfaktors.

Die Simulation der tatsächlich abgeschiedenen Schichtdicke d_{sim} bei Kontrolle mittels Schwingquarz lässt sich durch Gleichung (2.32) beschreiben.

$$d_{sim} = \Delta d_{Tool} \cdot d_{Soll} + \Delta d_{shut} \quad (2.32)$$

d_{Soll} bezeichnet die Solldicke und Δd_{Tool} und Δd_{shut} die apodisiert normalverteilten Parameter der linearen Funktion, welche materialspezifische Standardabweichungen besitzen. Im idealen schwankungsfreien Fall gilt $\Delta d_{Tool} = 1$ und $\Delta d_{shut} = 0$. Da systematische Fehler vernachlässigt werden, entsprechen diese Werte den angenommenen Mittelwerten. Der Parameter Δd_{Tool} beschreibt Variationen des Toolingfaktors, während Δd_{shut} Fluktuationen in den Shutterreaktionszeiten beinhaltet.

Tritt der Fall auf, dass während der Berechnung nach Gleichung (2.32) negative Schichtdicken ermittelt werden, erfolgt die Bestimmung der Zufallszahlen sowie der physikalischen Dicke erneut.

2.4.4. Abweichung der Schichtdicke vom Sollwert im Fall von BBM

Bei BBM haben die Fluktuationen des Messsignals den größten Einfluss auf die zufälligen Schwankungen der Schichtdicke. Die Beschreibung erfolgt über zwei normalverteilte Parameter, welche das auftretende statistische Rauschen ΔI_{abs} (Mittelwert 0) und einen intensitätsabhängigen Anteil des Rauschens ΔI_{rel} (Mittelwert 1) berücksichtigen.

Ausgehend von dem gemittelten Intensitätsspektrum der Lichtquelle I_{Lampe} und den unter Berücksichtigung des Signalrauschens simulierten Intensitätsspektren von Lichtquelle $I_{Lampe,sim}$ und Probe $I_{Probe,sim}$ lässt sich das Transmissionsvermögen T_{Sim} entsprechend Gleichung (2.33) berechnen. T_{Theor} bezeichnet das theoretisch zu erwar-

2.4. COMPUTERGESTÜTZTE SIMULATION DES BESCHICHTUNGSPROZESSES: ERSTE
MODELLVORSTELLUNG

Effekt	Mögliche Ursache	Modellannahmen	Datenbeschaffung
Schwankungen in den optischen Konstanten	Fluktuationen in den Prozessparametern	Oszillatormodell mit normalverteilten Parametern	Reproduzierbarkeitsversuche + Analyse der optischen Konstanten entsprechend dem Oszillatormodell
Schwankungen in der Schichtdicke bei Abscheidung mit Schwingquarz	Ratenschwankungen und Shutterreaktionszeiten	Lineare Überlagerung von zufälligem Offset und Ratenschwankungen entsprechend Gleichung (2.32)	Reproduzierbarkeitsversuche für verschiedene Schichtdicken
Schwankungen in der Schichtdicke bei Abscheidung mit OptiMon	Fluktuationen in den Intensitätsspektren als Ursache für Schwankungen in den Transmissionspektren	Transmission als Intensitätsverhältnis mit zufälligem Rauschen entsprechend Gleichung (2.33)	Messungen von Dunkel- und Lampenintensitätsspektren

Tabelle 2.1.: Zusammenfassung der berücksichtigten Effekte im Fall der virtuellen Beschichtungsprozesse

tene Transmissionsvermögen für die Solldicke und die angenommenen theoretischen optischen Konstanten.

$$T_{Sim} = \frac{I_{Probe,sim}}{I_{Lampe,sim}} = \frac{\Delta I_{abs} + (I_{Lampe} \cdot T_{Theor}) \cdot \Delta I_{rel}}{\Delta I_{abs} + I_{Lampe} \cdot \Delta I_{rel}}. \quad (2.33)$$

Ausgehend von dem Transmissionsvermögen T_{Sim} und dem festgelegten Satz an optischen Konstanten erfolgt die Berechnung der Schichtdicke analog der Software OptiMon, welche in der verwendeten Beschichtungsanlage als optisches breitbandiges Monitorsystem zum Einsatz kommt [Wil08].

Eine Zusammenfassung aller Effekte, welche für die Simulation berücksichtigt werden, ist in Tabelle 2.1 gegeben.

2.4.5. Shift

Der Shift auf Grund thermischer Ausdehnung und der Porosität der Schichten wird im Modell berücksichtigt. Analog [Sul92] und [Ste09a], soll auch in diesem Fall der Shift in den Transmissions- und Reflexionsspektren auf Änderungen der optischen Dicke nd zurückgeführt werden. Die Beschreibung erfolgt mit Hilfe der Änderung der Schichtdicke (Gleichung (2.29)) und des Brechungsindex des Materials für verschiedene Temperaturen und Umgebungsmedien. Unter der Bedingung eines geringen Shifts, lässt sich der Brechungsindex über eine lineare Interpolation [Kin69] [Bir74] der Brechungsindizes eines Mischsystems entsprechend Gleichung (2.34) bestimmen

$$n \approx p \cdot n_{Solid} + (1 - p) \cdot n_{Poren}. \quad (2.34)$$

Modifikationen im Extinktionskoeffizienten werden nicht angenommen.

2.5. Vorstellung Designs und Spezifikationen

Um das begründete Modell verifizieren zu können, wurden zwei Antireflexdesigns und ein Strahlteilerdesign ausgewählt. Diese dienen zum Vergleich zwischen den simulierten und den tatsächlich durchgeführten Beschichtungsexperimenten und damit verbunden zur Optimierung des Modells und des Reoptimierungsalgorithmus.

2.5.1. Antireflex-Design

Antireflexbeschichtungen finden in der Optik eine Vielzahl von Anwendungen. Die Verringerung des Reflexionsvermögens wird zur Vergütung von Objektiven oder Okularen verwendet und zur Vermeidung unerwünschter Reflexionen bei Brillengläsern, Fenstern oder Bildschirmen. Zur Verifikation des Dünnschichtmodells werden verschiedene Antireflexdesigns bezüglich unterschiedlicher Abscheidestrategien untersucht. Folgende zwei Spezifikationen sollen erfüllt werden:

- Spezifikation 1: Bei senkrechtem Einfallswinkel soll das Reflexionsvermögen des Interferenzschichtsystems den Wert 0,7% nicht überschreiten. Diese Festlegung soll in einem Wellenlängenbereich von 400 bis 500 nm erfüllt sein.
- Spezifikation 2: Für den Lichteinfall unter einem Einfallswinkel von 45° soll der Mittelwert des Reflexionsvermögens von s- und p-polarisiertem Licht (im

Folgenden als a-polarisiert bezeichnet) kleiner gleich 1,2% sein. Diese Festlegung gilt im Wellenlängenbereich 400 bis 500 nm.

In beiden Fällen gilt die Spezifikation für ein quasi unendlich ausgedehntes Substrat.

Mit Hilfe der Design-Software OptiLayer [Tika] wurden unter Verwendung der drei Materialien SiO_2 , Nb_2O_5 und Ta_2O_5 aus einer Vielzahl an Möglichkeiten zwei Designs ausgewählt. In Abbildung 2.14 sind die Brechzahlverläufe über die physikalische Dicke grafisch dargestellt, sowie die zugehörigen Reflexionsspektren.

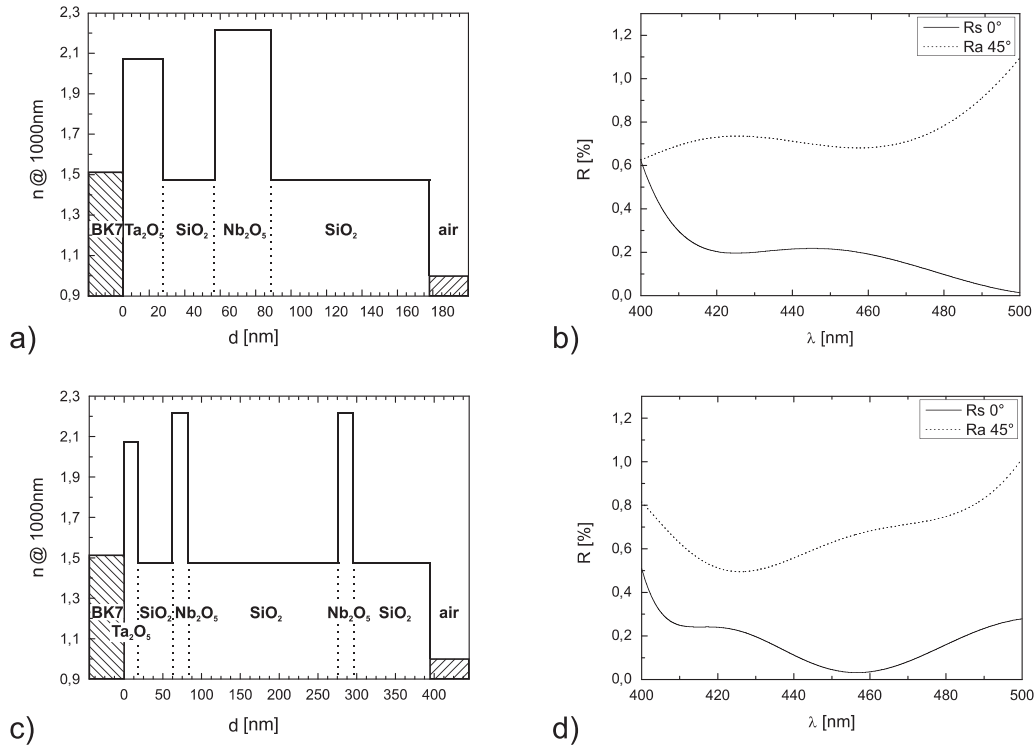


Abbildung 2.14.: Design 1: (a) Brechzahlverlauf über physikalische Dicke und (b) theoretisches Reflexionsspektrum. Design 2: (c) Brechzahlverlauf über physikalische Dicke und (d) theoretisches Reflexionsspektrum.

Bei Design 1 handelt es sich um ein 4-Schicht System mit der Schichtabfolge Ta_2O_5 , SiO_2 , Nb_2O_5 und SiO_2 , beginnend auf dem Substrat BK7. Die Gesamtdicke beträgt 172,7 nm. Design 2 besteht aus 6 Schichten der Reihenfolge Ta_2O_5 , SiO_2 , Nb_2O_5 , SiO_2 , Nb_2O_5 und SiO_2 ebenfalls auf BK7, mit einer Gesamtdicke von 394,0 nm.

2.5.2. Strahlteiler

Bei diesem Interferenzschichtsystem handelt es sich um einen Strahlteiler aus 9 Schichten, bestehend aus den drei Materialien SiO_2 , Nb_2O_5 und Ta_2O_5 mit dem Substrat Q1. Der Strahlteiler ist für senkrechten Lichteinfall spezifiziert. Das Transmissionsvermögen soll im Wellenlängenbereich 400 nm bis 700 nm zwischen 48,3% und 51,7% liegen, wobei von einem endlich dicken Substrat ausgegangen wird.

Der Brechungsindex als Funktion der physikalischen Dicke und das theoretische Transmissionsvermögen sind in Abbildung 2.15 grafisch dargestellt.

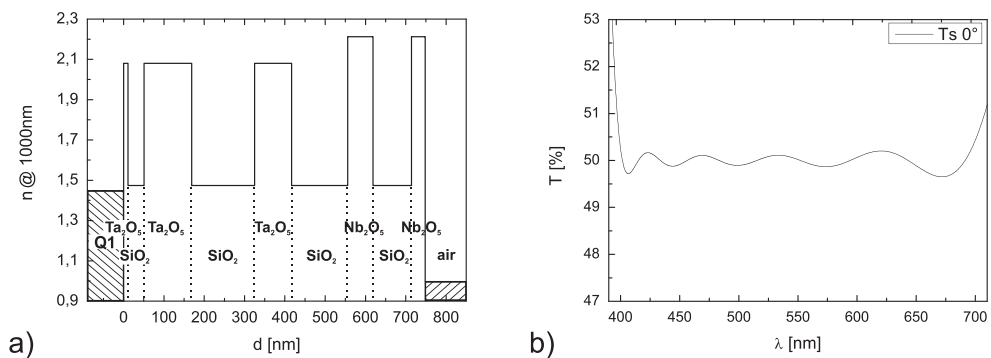


Abbildung 2.15.: Brechzahlverlauf über physikalische Dicke (a) und theoretisches Transmissionsspektrum (b) des Strahlteilers

2.5.3. Bewertungskriterium für die Beurteilung des Beschichtungserfolges

Die Vermessung von Transmissions- und Reflexionsspektren ist stets mit Fehlern behaftet. Diese Messfehler müssen bei der Auswertung sowohl der Experimente, als auch der Simulationen betrachtet werden. Im folgenden werden Messungenauigkeiten von 0,3% in Transmission und Reflexion festgelegt, was dem Messfehler des verwendeten Spektrometers entspricht.

Für eine sichere Identifikation von Fehlversuchen werden die Toleranzen der Spezifikationen erweitert, womit sich für die AR-Designs 1,0% (Spezifikation 1) und 1,5% (Spezifikation 2) Reflexion ergeben. Im Falle des Strahlteilers bedeutet dies eine Toleranz von 48% bis 52% für die Transmission. Zusätzlich wird die Festlegung getroffen,

dass erst bei vollständiger Überschreitung dieser Grenzen in mindestens einem Wellenlängenbereich von 3 nm von einem Fehlversuch gesprochen wird.

Der Anteil der erfolgreichen Versuche zur Anzahl der gesamt durchgeführten Versuche wird als Gutasbeute bezeichnet und gibt somit an, welcher Anteil der Versuche nicht außerhalb der um die Messunsicherheit erweiterten Toleranzen liegt.

3. Experimentelle Arbeiten

3.1. Beschichtung der Einzelschichten, sowie der Demonstratoren

Das Ziel der Arbeit liegt in der Begründung eines Modells zur Prognose optischer Eigenschaften oxidischer Beschichtungen. Dazu wurden Metalloxide ausgewählt, welche auf Grund der Projektarbeit von Interesse sind und aus denen die zu erzeugenden Mehrschichtsysteme aufgebaut werden sollen.

Folgende dielektrische Materialien wurden untersucht: SiO_2 , Nb_2O_5 , Ta_2O_5 und TiO_2 . Die verwendeten Substrate und Prozessparameter sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst. Angegeben ist die an der Plasmaquelle wirksame Bias-Spannung U_{Bias} , der Sauerstofffluss (in Standardkubikzentimeter pro Minute [sccm], was einem Gasvolumen von 1 cm^3 unter Normalbedingung pro Minute entspricht), der Emissionsstrom I_{Em} des verwendeten Elektronenstrahlverdampfers und die Abscheiderate.

Während der Beschichtungsprozesse wurden die Substrate auf 100°C geheizt und das zu untersuchende Material bei kontinuierlicher Kalottendrehung, mit einer Periodendauer von 1,7 s, aufgedampft. Zur Analyse der Reproduzierbarkeit wurden jeweils 5 - 10 Versuche unter den selben Prozessbedingungen für eine vorgegebene Solldicke durchgeführt. Dies dient zur Untersuchung des Einflusses von Schwankungen in den Prozessparametern bei Verwendung des gleichen Prozesses. Auf Grund der Abhängigkeit der Schichtdickenschwankungen von dem Sollwert der physikalischen Dicke ist die Reproduzierbarkeit der Schichtdicke für unterschiedliche Solldicken von Interesse. Daher fanden zusätzlich Versuchsreihen für verschiedene vorgegebene Sollwerte der Schichtdicken statt. Die Anzahl der Versuche N_{Versuche} und betrachteten Solldicken sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

Für die Verdampfung von SiO_2 wurde ein Ein-Napf-Tiegel und der Elektronenstrahlverdampfer HPE10 verwendet, für die drei verbleibenden Materialien ein Vier-Napf-Tiegel unter Verwendung der Quelle HPE6 [SYR]. In allen durchgeführten Be-

Material	Substrat	Solldicke [nm]	N_{Versuche}	U_{Bias} [V]	O ₂ -Fluss [sccm]	I_{Em} [mA]	Rate [nm/s]
SiO ₂	SF10	30	6	140	15	95	0.2
		200	6				
		300	10				
Nb ₂ O ₅	SQ1	200	5	110	30	230	0.2
		300	5				
Ta ₂ O ₅	BK7	20	5	140	15	220	0.2
		200	10				
		500	6				
TiO ₂	B270	50	5	100	30	210	0.2
		100	5				
		200	7				

Tabelle 3.1.: Prozessbedingungen der Experimente zur Untersuchung der Reproduzierbarkeit

schichtungsexperimenten zur Bestimmung der Reproduzierbarkeit wurde der Verdampfungsprozess mit Hilfe von OptiMon kontrolliert und darüber der Abschaltzeitpunkt festgelegt. Die zusätzliche Aufzeichnung der am Schwingquarz gemessenen Schichtdicken dient zur Bestimmung der Schichtdickenschwankungen im Fall der Kontrolle mit Schwingquarz.

Zur Herstellung der AR-Designs (Abbildung 2.14) und des Strahlteilers (Abbildung 2.15) wurde ebenfalls die Verdampfungsanlage SYRUSpro 1100 verwendet, wobei die drei verwendeten Materialien entsprechend den Prozessbedingungen in Tabelle 3.1 verdampft wurden.

Die ausgewählten AR-Designs wurden mit beiden zur Verfügung stehenden Kontrollmethoden (Schwingquarz, OptiMon Version 3.5) vollständig abgeschlossen. Im Fall der BBM des zweiten Designs scheiterte die Abscheidung in allen Versuchen in der dritten Schicht. Die mittels OptiMon 3.5 berechnete Schichtdicke vor dem Beginn des Beschichtungsprozesses war in allen Fällen bereits größer als die Solldicke, was zur sofortigen Abschaltung führte. Auf Grund dieses Effekts wurde das zweite AR-Design zusätzlich unter Verwendung einer hybriden Strategie bedampft. Die Monitorierung der dritten Schicht erfolgte über Schwingquarz, wogegen die restlichen Schichten mit OptiMon 3.5 kontrolliert wurden.

Auf Grund benötigter Zusatzfunktionen für die Verwendung der Reoptimierungsroutine wurde von Tikhonravov und Trubetskov eine neue Version des Abschaltalgorithmus entwickelt und bereitgestellt, was zur OptiMon Version 3.14 führte. Die AR-Designs wurden folglich zusätzlich mit dieser Version monitoriert.

Die Kontrolle der Strahlteilerpräparation erfolgte unter Verwendung von Schwingquarz, sowie OptiMon 3.14 mit und ohne Reoptimierung.

Design	Methode	N	Bemerkung
AR-Design 1	Schwingquarz	4	1 - 3: ex-situ kalibriert 4: in-situ kalibriert
AR-Design 1	OptiMon 3.5	3	
AR-Design 1	OptiMon 3.14	3	
AR-Design 2	Schwingquarz	6	1 - 3: ex-situ kalibriert 4 - 6: in-situ kalibriert
AR-Design 2	OptiMon 3.5	4	1 - 4: 3. Schicht nicht abgeschieden 4: 6. Schicht nicht abgeschieden
AR-Design 2	hybrid	3	
AR-Design 2	OptiMon 3.14	3	2, 3: SiO ₂ neu eingeschmolzen
Strahlteiler	Schwingquarz	5	1: ex-situ kalibriert 2 - 5: in-situ kalibriert
Strahlteiler	Schwingquarz + Reoptimierung	4	in-situ kalibriert 2: neues Anodenrohr 1, 3: SiO ₂ neu eingeschmolzen
Strahlteiler	OptiMon 3.14	4	3: neuer Schwingquarz 1, 3: SiO ₂ neu eingeschmolzen
Strahlteiler	OptiMon 3.14 + Reoptimierung	4	3: neues Anodenrohr 1, 3: SiO ₂ neu eingeschmolzen

Tabelle 3.2.: Übersicht über die Experimente zur Abscheidung der Demonstratoren

Eine Übersicht über die durchgeführten Experimente bietet Tabelle 3.2. Neben dem Design und der Monitorierstrategie sind zusätzlich die Anzahl der Versuche und gegebenenfalls Bemerkungen angegeben. Die Bezeichnungen ex-situ und in-situ kalibriert beziehen sich auf die Kalibrierung des Schwingquarzes. Im Fall der ex-situ Kalibrierung wurden Toolingfaktor und Offset entsprechend Gleichung (2.32) über Vorversuche verschiedener Schichtdicken von Einzelschichtsystemen ermittelt. In-situ Kalibrierung hingegen bedeutet die Korrektur der im Prozess angegebenen Solldicken

ausgehend von zusätzlich mit Hilfe von OptiMon ermittelten Schichtdicken bei der Abscheidung der Mehrschichtsysteme.

3.2. Messungen von Transmission und Reflexion

Zur ex-situ Messung der Transmissions- und Reflexionsspektren der untersuchten Proben wurden die UV/VIS Spektrometer Lambda 900 und Lambda 950 der Firma Perkin Elmer verwendet. Messungen sind sowohl bei näherungsweise senkrechtem Lichteinfall (6°), als auch unter Verwendung des Lambda 900 bei einem Einfallswinkel von 45° möglich. Dazu wurden zwei am IOF entwickelte VN-Einsätze verwendet.

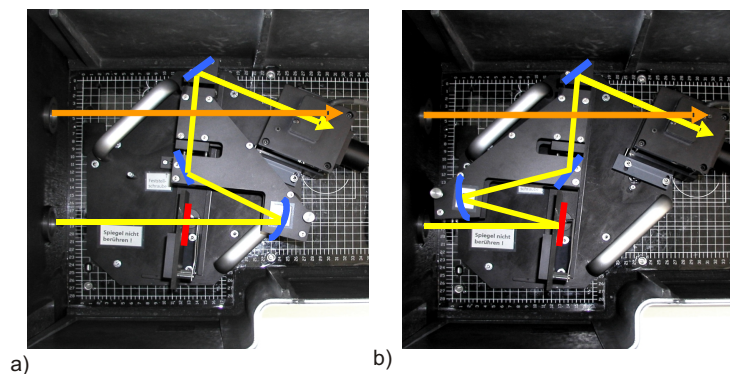


Abbildung 3.1.: Messeinsatz zur a) Transmissions- und b) Reflexionsmessung (am IOF entwickelt) für einen Einfallswinkel von 6°

Der Strahlengang des VN-Einsatzes für 6° ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Schichtsysteme, welche auf planparallelen ebenen Substraten abgeschieden wurden, können vermessen werden. Dabei sind nicht nur präzise Messungen von Reflexions- und Transmissionsspektren möglich, auch die Verwendung des selben Messflecks kann sichergestellt werden.

Die sechs Messungen der SiO_2 -Einzelschichten auf SF10 für die Solldicke 200 nm sind in Abbildung 3.2 über einen Wellenlängenbereich von 200 nm bis 1200 nm aufgetragen. Die gemessenen Spektren der restlichen Versuche zur Reproduzierbarkeit für jeweils eine Solldicke pro Material sind in den Abbildungen A.1 bis A.3 im Anhang zu finden. Neben den prozesstypischen Abscheidefehlern wurden zusätzlich folgende Effekte berücksichtigt:

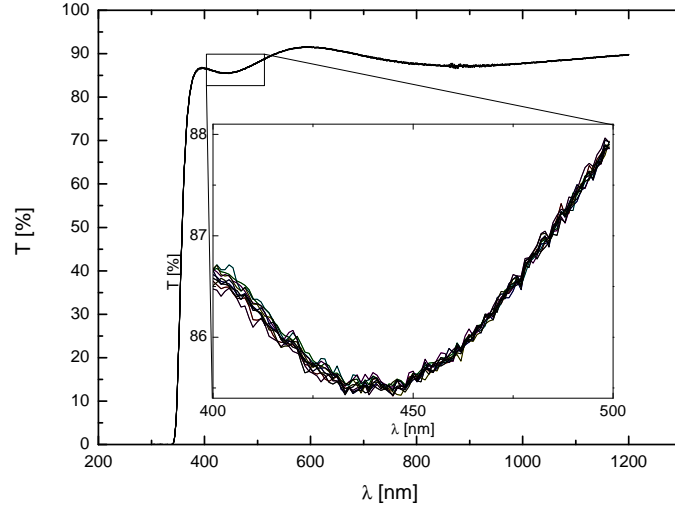


Abbildung 3.2.: Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionsspektren der Einzelschichten des Materials SiO_2 für Solldicke 200 nm

- neues Anodenrohr der Plasmaquelle,
- Wechsel des verwendeten Schwingquarzes und
- Einschmelzen von neuem Ausgangsmaterial.

Um die zufälligen Fehler bei der Messung der Transmission und der Reflexion zu ermitteln, wurde zusätzlich eine SiO_2 -Einzelschicht mit der Solldicke 200 nm 10 mal innerhalb von zwei Tagen vermessen. Die Transmissions- und Reflexionsspektren zwischen 200 nm und 1200 nm sind in Abbildung 3.3 dargestellt. Auf Grund der Vermessung an zwei verschiedenen Tagen ist, neben dem zufälligen Fehler auf Grund der Messungenauigkeit des Spektrometers, der Einfluss der Probenposition sowie die Änderung der 100%-Linie berücksichtigt worden. Systematische Fehler werden hierbei nicht erfasst. Analoge Messungen wurden an einer Ta_2O_5 -Einzelschicht durchgeführt und sind in Abbildung A.4 dargestellt.

Die gemessenen Reflexionsspektren $R_{s/p}$ der Antireflex-Designs im Wellenlängenbereich von 400 - 500 nm beinhalten die Reflexion an der Substratrückseite. Entsprechend der Spezifikationen werden die Reflexionsspektren $\hat{R}_{s/p}$ unter Betrachtung

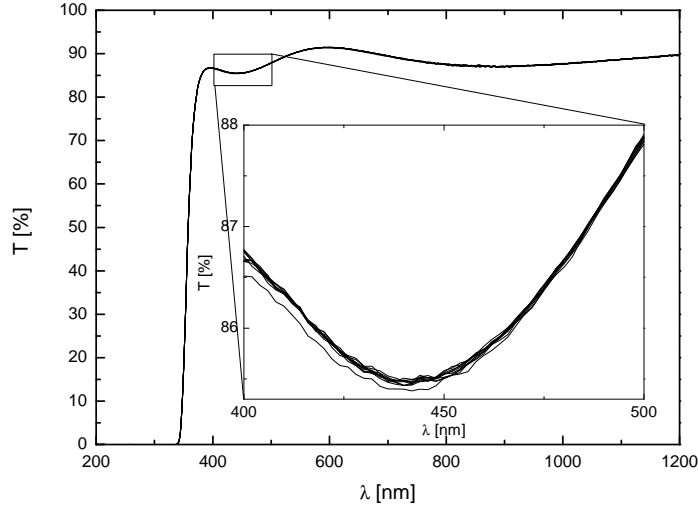


Abbildung 3.3.: Versuche zur Messungenauigkeit: Transmission einer 10 mal vermesenen SiO₂-Einzelschicht für Solldicke 200 nm

eines quasi unendlichen Substrates gesucht. $\hat{R}_{s/p}$ wird nach Gleichung (3.1) ermittelt.

$$\hat{R}_{s/p}[\%] = \frac{R_{s/p} - R_{0,s/p}}{1 + R_{s/p} \cdot R_{0,s/p} - 2 \cdot R_{0,s/p}} \cdot 100\% \quad (3.1)$$

$R_{0,s/p}$ bezeichnet das Reflexionsvermögen, was sich bei Reflexion an der Grenzfläche Substrat und Luft ergibt, und welches man durch Quadrieren von r_s und r_p aus Gleichung (2.16) erhält. s/p bezeichnen den Polarisitionszustand der reflektierten Strahlung.

Die daraus erhaltenen Reflexionsspektren für beide Designs und alle Abscheidestrategien werden im Kapitel “Ergebnisse“ vorgestellt und sind in den Abbildungen 4.2 und 4.3 dargestellt, außer AR-Design 2 mittels OptiMon 3.5. Abbildung 4.8 zeigt die Transmissionsspektren der abgeschiedenen Strahlteiler für beide Monitorierstrategien mit und ohne Reoptimierung durch Anpassung der verbleibenden Schichtdicken.

3.3. Vermessung der Oberflächenrauheit

Zur Bestimmung der Oberflächen- und Grenzflächenrauheiten der zu untersuchenden Systeme wurde das Vierkreisdiffraktometer XRD 3000PTS der Firma Richard Seifert und Co. Ahrensburg verwendet. Die Vermessung erfolgte an der Professur für Röntgen- und Neutronendiffraktometrie der Technischen Universität Chemnitz. Eine detaillierte Beschreibung von Versuchsaufbau und Funktionsweise des Diffraktometers findet sich in [Keh04]. Im Folgenden soll nur eine grobe Darstellung gegeben werden.

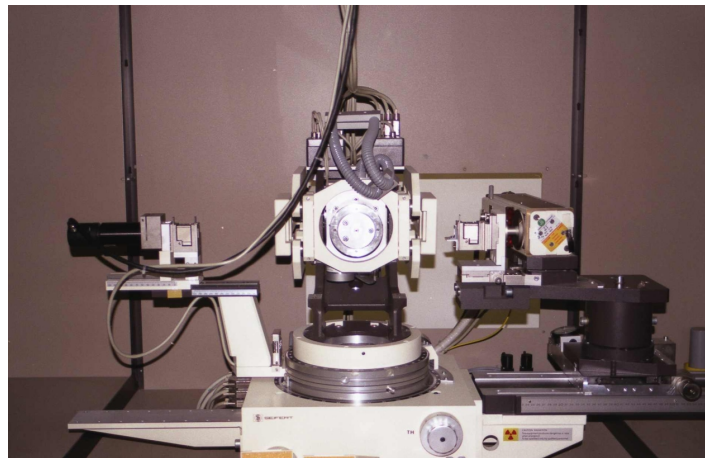


Abbildung 3.4.: Verwendetes Goniometer MZ VI

Zum Einsatz kommt das Goniometer MZ VI, welches in Abbildung 3.4 dargestellt ist. Zur Erzeugung der Röntgenstrahlung wird der Röntgengenerator ID3000 verwendet, welcher aus der mit Wasser gekühlten Feinstfokusröhre FK 61-01 Cu und einer Kupferanode der Firma Thales Electron Devices [Tha] besteht. Als Detektor wird der Szintillationszähler Hamamatsu R269 [Ham] eingesetzt.

Für die Bestimmung von Oberflächen- und Grenzflächenrauheiten werden Messungen in Reflexion für den doppelten Einfallswinkel 2Θ im Bereich $0,2^\circ$ bis 6° durchgeführt. Aus den aufgenommenen Intensitätsverläufen in Abhängigkeit des Winkels 2Θ , lassen sich sowohl die Schichtdicke, als auch die gesuchten Rauheiten bestimmen.

Untersucht wurde jeweils eine Einzelschicht der vier ausgewählten Materialien mit Solldicken kleiner 100 nm. Unter Nutzung asymmetrischer 2:1 Messung [Keh04] wurden die Proben vermessen. Die dazu verwendeten Einstellungen sind in Tabelle 3.3 zu finden.

Material	Substrat	Solldicke [nm]	2Θ [°]	$\Delta(2\Theta)$ [°]	ΔT [s]
SiO ₂	SF10	30	0.2 - 2.3	0.005	2
			2.3 - 3	0.01	5
			3 - 5	0.02	10
Nb ₂ O ₅	SQ1	50	0.2 - 3	0.005	2
			3 - 4	0.01	5
			4 - 6	0.02	10
Ta ₂ O ₅	BK7	20	0.2 - 3	0.005	2
			3 - 5	0.01	5
TiO ₂	B270	50	0.2 - 2.5	0.005	2
			2.5- 3.5	0.01	5
			3.5 - 5	0.02	10

Tabelle 3.3.: Einstellungen am XRD 3000PTS zur Vermessung der Einzelschichten

Für die Auswertung der optischen Spektren wurde angenommen, dass Oberflächen- und Grenzflächenrauheiten vernachlässigt werden. Um dies verifizieren zu können, sind Untersuchungen an den beschichteten Mehrschichtsystemen von Interesse. Die Auswahl fiel auf zwei Proben: Design 1 mit Monitorierung mittels OptiMon 3.5 (Versuch 2) und Design 2 nach Schichtdickenkontrolle mit Schwingquarz (Versuch 5). Die bei der Messung verwendeten Einstellungen sind in Tabelle 3.4 zusammengefasst.

Material	Substrat	2Θ [°]	$\Delta(2\Theta)$ [°]	ΔT [s]
AR-Design 1	BK7	0.2 - 2.7	0.005	2
		2.7 - 3.5	0.01	5
		3.5 - 6	0.02	10
AR-Design 2	BK7	0.2 - 3	0.005	2
		3 - 4	0.01	5
		4 - 6	0.02	10

Tabelle 3.4.: Einstellungen am XRD 3000PTS zur Vermessung der beiden Antireflexsysteme

Die gemessenen Intensitätspektren als Funktion des doppelten Einfallswinkel 2Θ sind für die Einzelschichten und die beiden Designs in der Anlage zu finden (Abbildungen A.5, B.1 und B.2).

4. Ergebnisse

4.1. Abscheidung ohne laufende Designkorrekturen

4.1.1. Simulation

Die durchgeführten Versuche zur Reproduzierbarkeit dienen zum einen zur Untermauerung der Festlegungen des Dünnschichtmodells, zum anderen zur Ermittlung der statistischen Schwankungen, welche für die Simulation herangezogen werden. Die Auswertung dieser Versuche ist detailliert in Anhang A.2 beschrieben. Ausgehend von den ausgewerteten Messungen sind die Modellannahmen von homogenen und glatten Schichten gerechtfertigt. Der Einfluss möglicher Inhomogenitäten ist im Rahmen unserer Messtechnik nicht nachweisbar und die Oberflächenrauheit der Einzelschichten ist deutlich geringer, als die verwendeten Wellenlängen. Fluktuationen in den optischen Konstanten liegen nur im Fall von SiO_2 außerhalb des zufälligen messbedingten Fehlers und werden damit nur für dieses Material in der Simulation berücksichtigt.

Anhand der ermittelten prozesstypischen Abscheidefehler lassen sich beliebige Beschichtungsprozesse für die untersuchten Materialien unter Verwendung der Prozessbedingungen in Tabelle 3.1 simulieren. Folgende Parameter, welche in Anhang A.2 und A.3 zu finden sind, werden für die Simulation berücksichtigt und als Inputdaten zur Verfügung gestellt:

- Δd und Δn zur Beschreibung von Shifteffekten auf Grund der thermischen Ausdehnung und der Porosität,
- Standardabweichung der Parameter der Regressionsgeraden zur Simulation der Schichtdickenschwankungen bei Kontrolle mittels Schwingquarz,
- Mittelwerte und Standardabweichungen der Oszillatorparameter, sowie auftretende Korrelationen für SiO_2 und

- Intensitätsspektrum der Lampe, sowie ΔI_{rel} und ΔI_{abs} zur Beschreibung der Intensitätsschwankungen.

Zur Verdeutlichung des Programmablaufs dient die Schematik in Abbildung 4.1. Für die zur Simulation benötigten normal- und gleichverteilten Parameter werden Zufallszahlengeneratoren verwendet, die von der Bibliothek NMath [NMa] zur Verfügung gestellt werden.

Die Modellierung der optischen Konstanten erfolgt unabhängig von der Abscheidemethode, wobei apodisiert normalverteilte Oszillatorparameter unter Betrachtung von Korrelationen ermittelt werden. Entsprechend Gleichung (2.13) werden die optischen Konstanten für jede Schicht berechnet.

Die Simulation der Schichtdicke erfolgt für beide Monitorierstrategien gesondert. Im Fall der Kontrolle mit Schwingquarz wird, ausgehend von der Solldicke unter Verwendung von Gleichung (2.32), die physikalische Dicke berechnet. Die Simulation der BBM gestaltet sich aufwendiger. Zunächst werden die Intensitätsspektren simuliert, in dem ausgehend vom Mittelwert des Lampenspektrums (Abbildung A.13) und den Standardabweichungen der Parametern ΔI_{rel} (0.0025) und ΔI_{abs} (20.0 counts) die Intensitätsspektren von Lampe und Probe berechnet werden. Bei beiden Intensitätsspektren werden für jede betrachtete Wellenlänge unterschiedliche Zufallszahlen für ΔI_{abs} und ΔI_{rel} verwendet.

Die Bestimmung des Transmissionsspektrums erfolgt anschließend über Gleichung (2.33), sowie der Mittelung von sieben aufeinanderfolgenden Pixeln und anschließender Zuordnung der Transmission im Bereich 400 nm bis 920 nm. Die Berechnung der Schichtdicke erfolgt über den von A.V. Tikhonravov und M.K. Trubetskov bereitgestellten Algorithmus [Tikb], unter Verwendung der theoretisch zu erwarteten optischen Konstanten (aus den Mittelwerten der Oszillatorparameter) und dem ermittelten Transmissionsspektrum. Dies entspricht der Vorgehensweise von OptiMon an der SYRUSpro 1100, mit dem Unterschied, dass dort die optischen Konstanten als Tabelle vorliegen. Bei Abschaltung mittels OptiMon wird auf Grund der Fehlerfortpflanzung [Tik06] die simulierte physikalische Dicke der Schicht von den bereits virtuell aufgedampften Schichten beeinflusst.

Durch einen zusätzlichen Satz an optischen Konstanten und Schichtdicken erfolgt die Betrachtung des Shift. Die Simulation selbst verwendet die Parameter für Vaku-

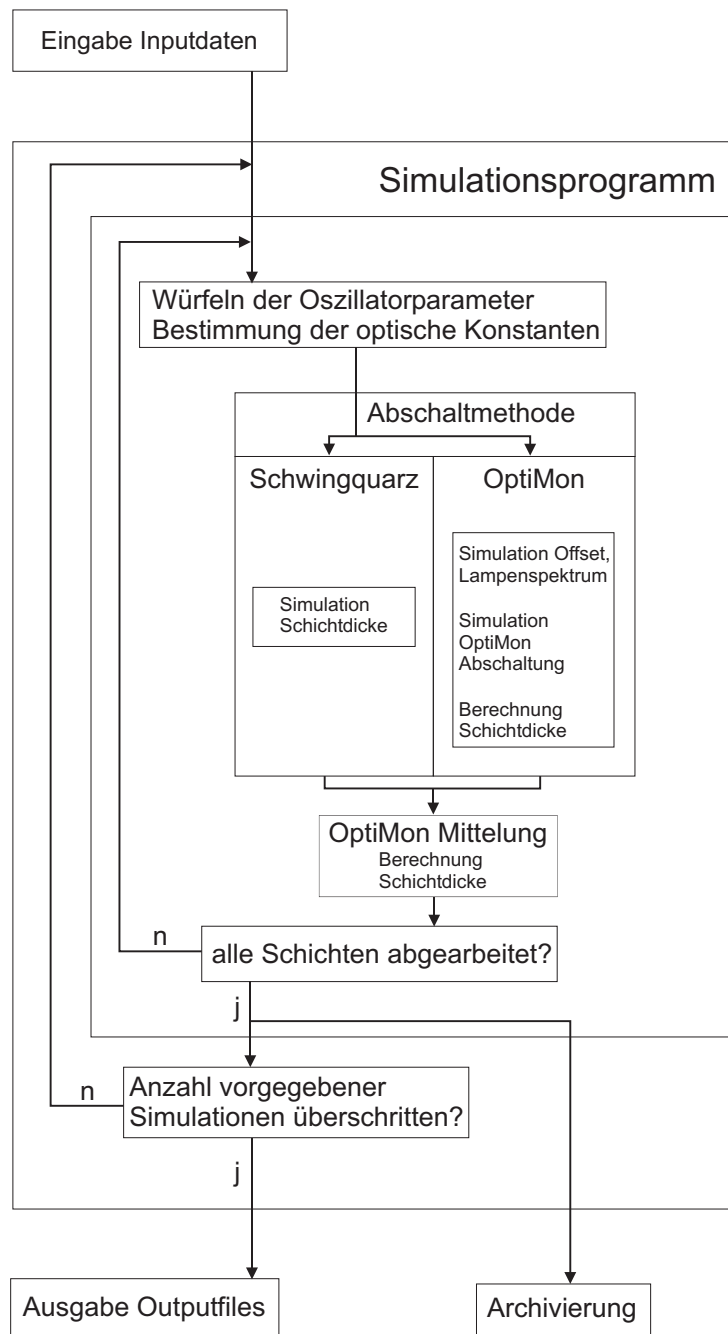


Abbildung 4.1.: Schematische Darstellung des Programmablaufs

um. Die anschließend ausgegebenen Systeme enthalten die optischen Konstanten und ermittelten Schichtdicken bei Betrachtung in Luft.

Die Simulation der beiden vorgestellten Antireflexdesigns wurde für beide Monitorstrategien durchgeführt. Design 2 ist mit der zunächst verwendeten Version OptiMon 3.5 nicht vollständig optisch virtuell abscheidbar (Abbruch in der 3. Schicht). Deshalb wurde dieses Design mit einer hybriden Abscheidestrategie simuliert, welche grundsätzlich als mittels OptiMon monitoriert festgelegt wurde, wobei für die dritte Schicht auf Abschaltung mittels Schwingquarz übergegangen wurde. Die Reflexionsspektren der Spezifikationen wurden für jeweils 50 Simulationsdurchläufe grafisch in den Abbildungen 4.2 (Design 1) und 4.3 (Design 2) durch schwarze Linien dargestellt.

Man erkennt zunächst deutlich, dass die optischen und hybriden virtuellen Abscheidungen mit wesentlich geringeren Schwankungen zwischen den Simulationsläufen versehen sind. Beide Designs sind je nach Spezifikation bei 400 nm oder 500 nm kritisch, was sich vereinzelt in der Übertretung der maximal erlaubten Reflexionen zeigt, welche in beiden Abbildungen 4.2 und 4.3 durch die gepunkteten Linien angedeutet sind. Die deutlich größeren statistischen Schwankungen bei Abschaltung mit Schwingquarz verursachen bei ungefähr 50% der Simulationen eine Verletzung der maximal vorgegebenen Spezifikationen.

Mit der neuen Version von OptiMon (3.14) wurden erneut Simulationen der AR-Designs durchgeführt, was ebenfalls in den Abbildungen 4.2 und 4.3 dargestellt ist. Die Abscheidung des zweiten Designs ist nun mittels BBM möglich. Beobachtbare stärkere Schwankungen zwischen den Simulationen im Vergleich zur vorherigen Version des optischen Monitoriersystems sind auf eine verbesserte Verwendung des Zufallszahlengenerators und den geänderten Abscheidealgorithmus zurückzuführen.

Zur Bestimmung der Gutasbeute wurde jedes Design für alle durchgeführten Strategien 1500-mal simuliert, um eine statistisch relevante Aussage treffen zu können. Der sich daraus ergebende Verlauf der Gutasbeuten in Abhängigkeit der Simulationsanzahl ist in Abbildung 4.4 ersichtlich. Es soll nochmal erwähnt werden, dass für die Auswertung eine Messungenauigkeit von 0,3% Reflexion angenommen wurde. Die Simulation gilt erst als Fehlversuch, wenn die dementsprechend erhöhten Toleranzen in einem Bereich von mindestens 3 nm überschritten wurden.

Auf Grund der hohen Gутаausbeuten, welche sich für alle Strategien und Designs ergeben haben, sind beide Antireflexsysteme für die Demonstration der Reoptimierung ungeeignet. Alle Versuche wurden ohne Reoptimierung durchgeführt.

4.1.2. Experimentelle Ergebnisse

Bereits bei der Durchführung der Beschichtungsexperimente wurde deutlich, dass bei Schichtdickenkontrolle mit ex-situ kalibriertem Schwingquarz deutliche Abweichungen zwischen dem theoretisch zu erwartenden und dem abgeschiedenen Design auftraten. Dies ist auf systematische Fehler in den Schichtdicken zurückzuführen. Die Reflexionsspektren aller Designs und Monitorierstrategien sind in den Abbildungen 4.2 und 4.3 im Wellenlängenbereich 400 nm bis 500 nm ohne Berücksichtigung von Reflexion an der Substratrückseite dargestellt. Nicht abgebildet ist die Abscheidung des zweiten AR-Designs mittels OptiMon 3.5. Die Ergebnisse der BBM und der Kontrolle mit in-situ kalibriertem Schwingquarz sind durch rote Linien dargestellt, Schichtdickenkontrolle mit ex-situ kalibriertem Schwingquarz durch blaue Linien.

Man erkennt zunächst, dass die beobachtbaren Schwankungen bei Kontrolle mit Schwingquarz geringfügig größer sind und dass sich die spektralen Verläufe unterscheiden. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass im Fall des in-situ kalibrierten Schwingquarzes noch immer Abweichungen zwischen der Solldicke und tatsächlich aufgedampften Schichtdicke auftreten, welche jedoch deutlich geringer sind als bei ex-situ Kalibrierung.

	AR-Design1		AR-Design2	
Material	Schichtdicke [nm]	rms-Rauheit [nm]	Schichtdicke [nm]	rms-Rauheit [nm]
Ta ₂ O ₅	21,7	0,51	(31,1)	(0,40)
SiO ₂	32,4	0,87	(45,5)	(1,26)
Nb ₂ O ₅	30,2	0,40	(15,0)	(3,10)
SiO ₂	86,1	0,69	194,5	0,30
Nb ₂ O ₅	-	-	17,5	0,43
SiO ₂	-	-	98,7	1,02

Tabelle 4.1.: Schichtdicke und rms-Rauheit der mittels XRR vermessenen Einzelschichten

An jeweils einem Versuch der beiden Designs wurden Röntgenreflektometriemessungen durchgeführt. Aus den Ergebnissen der Einzelschichten war ersichtlich, dass der Einfluss vernachlässigt werden kann, was in Anhang A.2 zu finden ist. Da sich aber in einem Mehrschichtsystem zusätzlich Grenzflächen zwischen den Schichten ausbilden, ist die Information von Interesse, ob auch in diesem Fall die Rauheit vernachlässigt werden kann. Die Anpassungen der im vorherigen Kapitel vorgestellten Messungen sind in den Abbildungen B.1 und B.2 dargestellt. Es muss berücksichtigt werden, dass mit den Röntgenreflektometriemessungen nur maximal bis zu einer Tiefe von 300 nm untersucht werden kann. Die Auswertung der ersten 3 Schichten (beginnend am Substrat) im Fall des zweiten Designs ist somit nicht aussagekräftig. Die Ergebnisse für Schichtdicke und Grenzflächenrauheit der beiden Schichtsysteme sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Die ermittelten Grenzflächenrauheiten liegen in der selben Größenordnung wie bei den Einzelschichten. Die Annahme der Vernachlässigung von Streuung ist damit konsistent.

4.1.3. Diskussion

4.1.3.1. OptiMon 3.5

Ausgehend von den getroffenen Annahmen und den Ergebnissen zur Reproduzierbarkeit wurde ein Modell erstellt, mit dem sich Beschichtungsprozesse simulieren lassen. Zum besseren Vergleich zwischen durchgeführten virtuellen und realen Versuchen sind die Simulationsergebnisse, sowie die Experimente in den Abbildungen 4.2 und 4.3 dargestellt.

Das erste AR-Design wurde mittels Schwingquarz (Abbildung 4.2a), b)), sowie OptiMon Version 3.5 (Abbildung 4.2c), d)) monitoriert. Bei Vergleich zwischen Simulation und Beschichtungsexperimenten erkennt man deutlich eine gute Übereinstimmung der Verläufe.

Im Fall der Abschaltung mit OptiMon 3.5 bilden zusätzlich die simulierten Schwankungen zwischen den einzelnen virtuellen Versuchen sehr gut die tatsächlichen Schwankungen ab. Ausgehend von der Simulation wird eine Gutasausbeute von 100% ermittelt. Dies ist konsistent mit dem Ergebnis, dass von den durchgeführten Beschichtungsexperimenten alle Versuche innerhalb der vorgegebenen maximalen Spezifikationen von 0,7% und 1,2% lagen. Daraus folgt, dass sich mit Hilfe der Simulation mittels BBM kontrollierte Beschichtungsprozesse sehr gut voraussberechnen lassen.

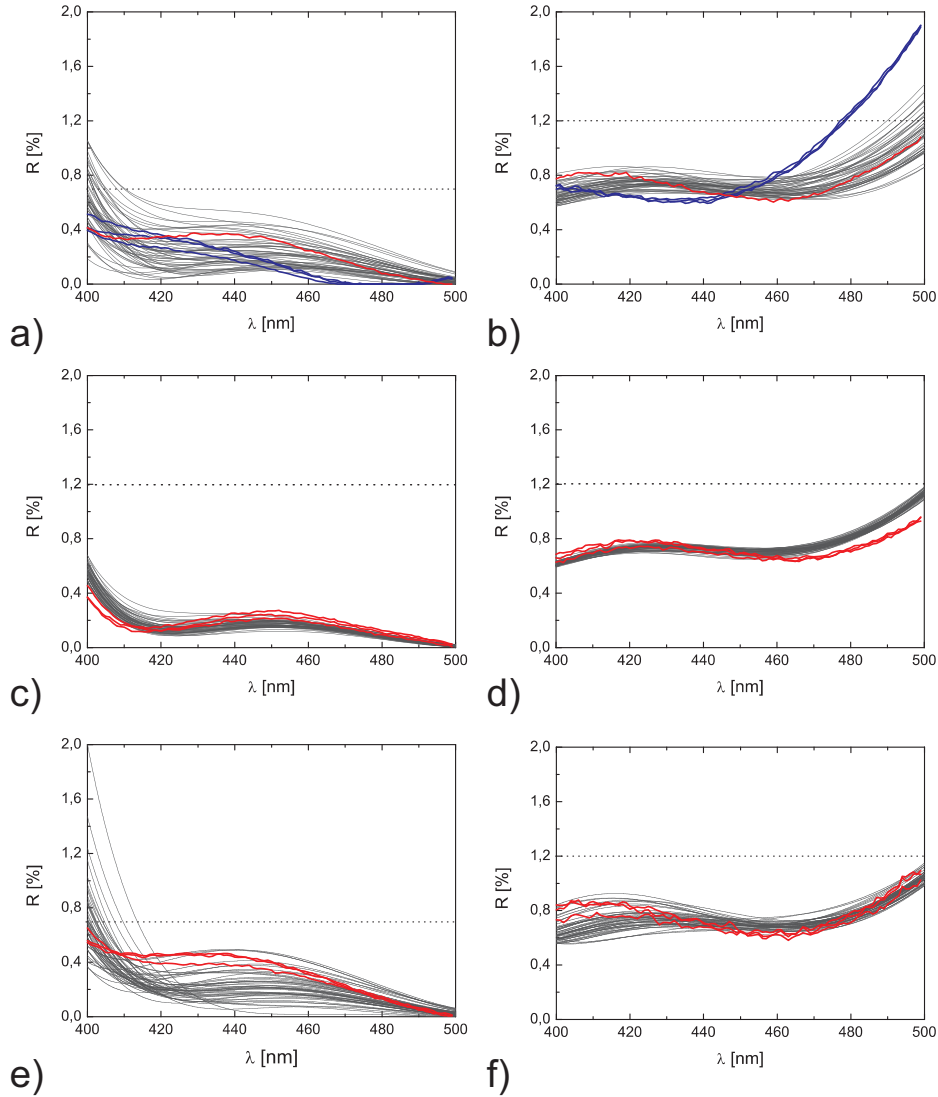


Abbildung 4.2.: Simulationen der Beschichtungen (grau) des ersten AR-Designs für a) Schwingquarz Spez 1 und b) Schwingquarz Spez 2, außerdem für c) OptiMon 3.5 Spez 1, sowie d) OptiMon 3.5 Spez 2. Auch zu sehen sind e) OptiMon 3.14 Spez 1 und f) OptiMon 3.14 Spez 2. Zusätzlich sind die Experimente mittels BBM und in-situ kalibriertem Schwingquarz (rot) und mittels ex-situ kalibriertem Schwingquarz (blau) dargestellt.

Bei Abscheidung mit Schwingquarz wurde nach den Simulationen eine Gutausbeute von 97% ermittelt. Die durchgeführte Beschichtung mit in-situ kalibriertem Schwingquarz war erfolgreich und die gemessenen Reflexionsspektren stimmen überein mit den virtuellen Versuchen.

AR-Design 2 ist mit der hybriden Strategie sehr genau abscheidbar. Die Abschaltung mittels Schwingquarzkontrolle zeigt im Vergleich zur hybriden Strategie eine schlechtere Performance.

Bei Untersuchungen zur BBM-monitorten Abscheidung des zweiten Designs sind die simulierten Probleme aufgetreten. Die dritten Schicht wurde in allen Fällen der Beschichtungsversuche nicht abgeschieden. Die Simulation ist somit ein sehr nützliches Werkzeug problematische Schichten aufzuzeigen und somit Fehlchargen zu vermeiden.

Bei Vergleich der Beschichtungen und der Simulationen für Schwingquarzkontrolle (Abbildung 4.3 a), b)) und der hybriden Strategie (Abbildung 4.3 c), d)) erkennt man zunächst eine gute Übereinstimmung der Reflexionsspektren. Die Abscheidung mittels Schwingquarz zeigt analoge Ergebnisse wie im Fall des ersten Designs. Die simulierten Schwankungen sind deutlich größer als in den Beschichtungsexperimenten. Erhaltene Fluktuationen der Schichtdicken der Einzelschichten sind somit nicht direkt auf Mehrschichtsysteme übertragbar. Aus den Untersuchungen der hybriden Strategie folgen geringfügig zu große simulierte Schwankungen, was auf die mit Schwingquarz abgeschiedene dritte Schicht zurückzuführen ist.

Für die Abweichungen der Reflexionsspektren zwischen den Beschichtungsexperimenten und den Simulationen findet sich die Ursache im verwendeten Substrat, welches unter Vakuum höhere Verluste besitzt, als ex-situ gemessen, und in der Annahme verlustfreier Schichten für die Umrechnung auf ein quasi unendliches Substrat. Dementsprechend wurde für den Strahlteiler das Substrat Q1 gewählt.

4.1.3.2. OptiMon 3.14

Zwischen der Abschaltung des ersten AR-Designs nach OptiMon Version 3.5 (Abbildung 4.2c), d)) und der Version 3.14 (Abbildung 4.2e), f)) erkennt man deutliche Unterschiede. Die Änderungen in den Simulationsergebnissen lassen sich unter anderem auf den geänderten Abschaltalgorithmus zurückführen und auf die Neuerungen bei der Bestimmung der Zufallszahlen, was das stärkere Auftreten von statistischen Ausreißern verursacht. Vor allem der Einfluss der Kathodenalterung auf die optischen

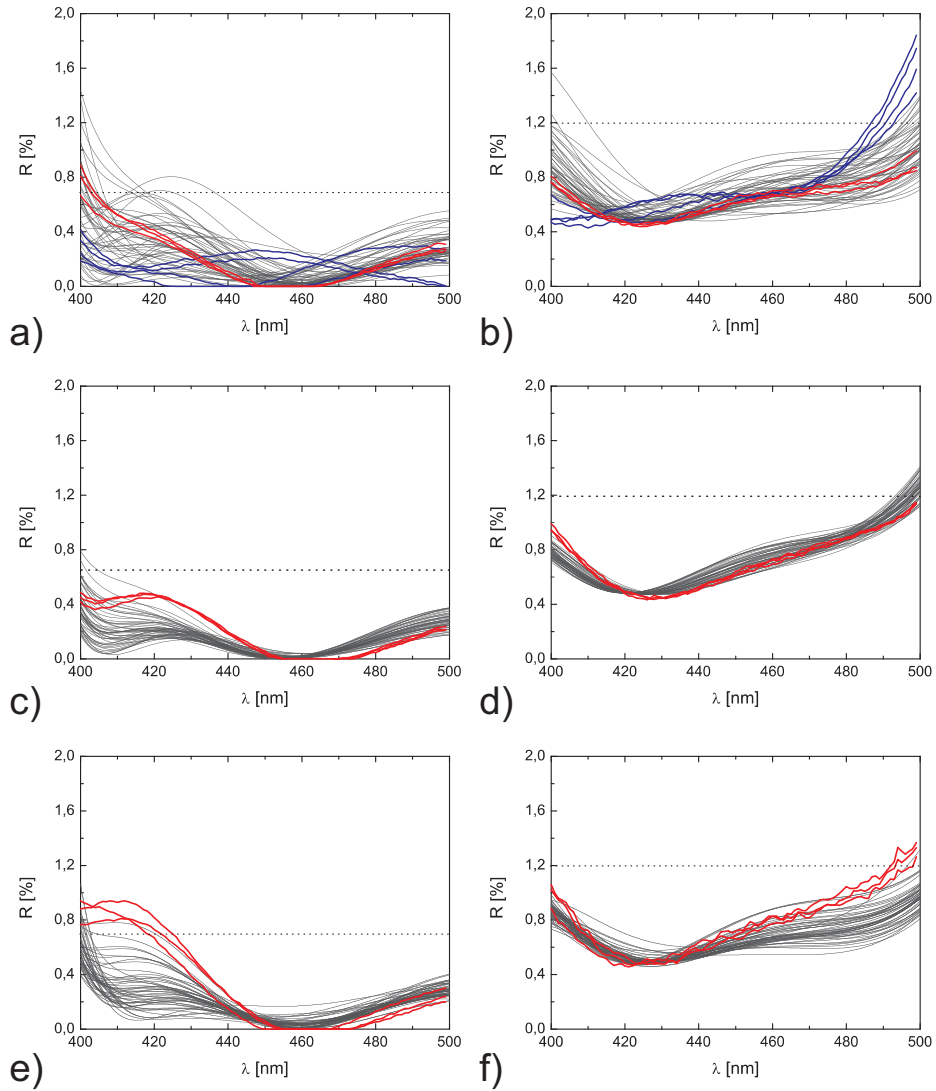


Abbildung 4.3.: Simulationen der Beschichtungen (grau) des zweiten AR-Designs für a) Schwingquarz Spez 1 und b) Schwingquarz Spez 2, außerdem für c) OptiMon 3.5 + Schwingquarz (hybrid) Spez 1, d) OptiMon 3.5 + Schwingquarz (hybrid) Spez 2, e) OptiMon 3.14 Spez 1 und f) OptiMon 3.14 Spez 2. Des Weiteren sind die Experimente mittels BBM und in-situ kalibriertem Schwingquarz (rot) und mittels ex-situ kalibriertem Schwingquarz (blau) dargestellt.

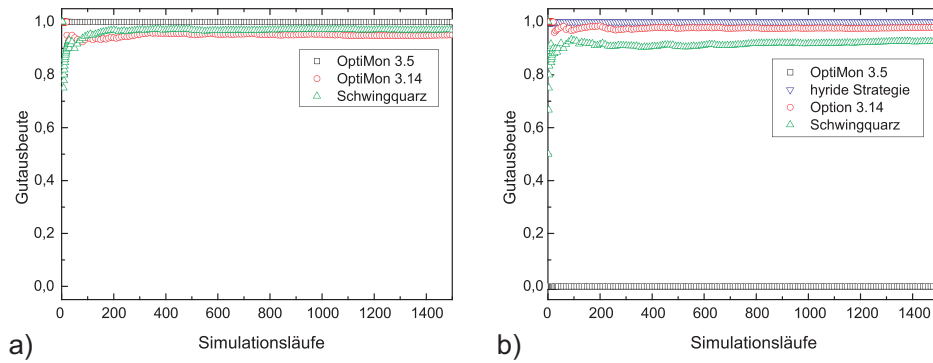


Abbildung 4.4.: Gutasbeute als Funktion der Anzahl der Simulationsdurchläufe für
a) Design 1 und b) Design 2

Konstanten der Materialien ist ausschlaggebend für die betrachteten Unterschiede. Untersuchungen zur Kathodenalterung werden in Kapitel 4.2.3 vorgestellt.

Auffällig ist, dass das zweite AR-Design durch den neuen Abschaltalgorithmus mit OptiMon 3.14 abscheidbar ist. Nach der Simulation ist für dieses Design eine Gutasbeute von 98% bestimmt wurden. Wie in Abbildung 4.3e), f) ersichtlich ist, waren alle Beschichtungsexperimente erfolgreich.

4.1.3.3. Vergleich

Um den Vergleich zwischen Simulation und Experiment zu verdeutlichen, findet sich die Zusammenfassung der simulierten Gutasbeuten und der Anzahl erfolgreicher Beschichtungsexperimente in Tabelle 4.2. Bei Verwendung der OptiMon Version 3.5 besitzt das erste AR-Design nicht nur die beste Performance, sondern auch die höchste Gutasbeute. Mit der OptiMon Version 3.14 hingegen ist auch das zweite Design optisch abscheidbar, jedoch verbunden mit höheren Schwankungen zwischen den Versuchen.

Demzufolge würde die Entscheidung welches Design und welche Strategie die höchste Erfolgsaussicht bereitstellt, auf Design 1 bei Verwendung von OptiMon 3.5 fallen. Die Aussage, welche Designs mit welcher Abschaltstrategie ein erfolgversprechendes Ergebnis liefern, ist für die praktische Nutzung ausschlaggebend und die Ursache für die Entwicklung des beschriebenen Modells.

Versuch	Simulation	Experiment
AR-Design 1, OptiMon 3.5	100%	3/3
AR-Design 1, OptiMon 3.14	95%	3/3
AR-Design 1, Schwingquarz	97%	1/1
AR-Design 2, OptiMon 3.5	0%	0/4
AR-Design 2, hybrid (OM 3.5)	100%	3/3
AR-Design 2, OptiMon 3.14	98 %	3/3
AR-Design 2, Schwingquarz	93%	3/3

Tabelle 4.2.: Vergleich simulierter Gutausbeuten in Prozent und erfolgreicher zu durchgeführter Beschichtungsversuche, wobei zur Auswertung nur Experimente herangezogen wurden, welche mittels BBM oder in-situ kalibriertem Schwingquarz kontrolliert wurden.

4.2. Abscheidung mit laufenden Designkorrekturen

4.2.1. Simulation

Auf Grund prozesstypischer Abscheidefehler kann es bei Beschichtungsversuchen zu kritischen Abweichungen vom Solldesign kommen, welche unter Umständen zu Fehlchargen führen können. Das Modell zur Simulation der Beschichtungsprozesse berücksichtigt diese Abscheidefehler und erlaubt eine Vorhersage der Wahrscheinlichkeit, dass ein vorgegebenes Design unter Verwendung einer bestimmten Abscheidestrategie erfolgreich verläuft.

Um die mögliche Gutausbeute zu erhöhen, wurde ein Reoptimierungskriterium entwickelt, welches während virtueller und tatsächlicher Beschichtungen die Anpassung verbleibender Schichtdicken gestattet, sofern diese im festgelegten Design erlaubt sind. Zur besseren Verdeutlichung ist eine Schematik in Abbildung 4.5 dargestellt.

Das Kriterium wird auf folgende drei Spektren aufgebaut:

- T_s : Theoretisch zu erwartendes Transmissionsspektrum unter Betrachtung der Sollwerte für Schichtdicke und optische Konstanten
- T_g : Transmissionsspektrum des tatsächlich abgeschiedenen, beziehungsweise simulierten Systems bei Berücksichtigung prozesstypischer Abscheidefehler

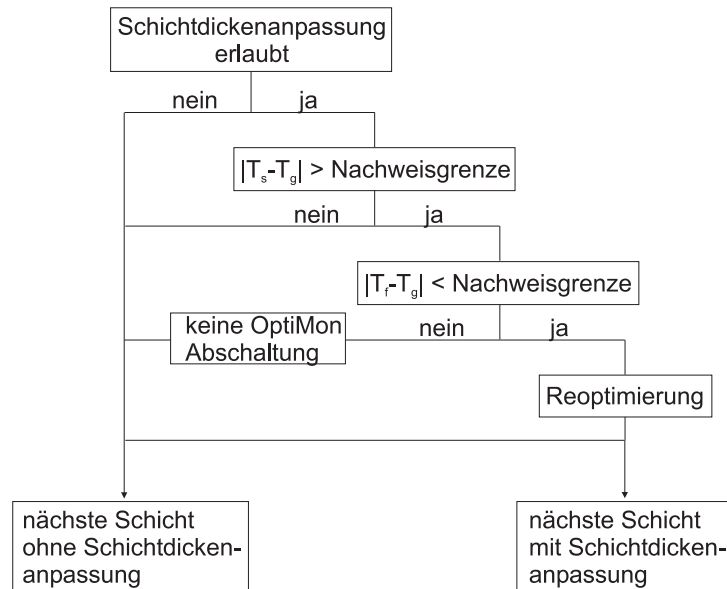


Abbildung 4.5.: Schematische Darstellung der Reoptimierungsroutine

- T_f : Transmission des modellierten Systems unter Verwendung der theoretisch zu erwarteten optischen Konstanten und der mittels OptiMon bestimmten Schichtdicke aus den gemittelten Transmissionsspektren.

Trotz des optisch messbaren Wellenlängenbereichs von 400 bis 920 nm wird für die Routine der Bereich auf 450 bis 920 nm verkürzt, um einen Vergleich mit realen Beschichtungsexperimenten zu gestatten. Die Ursache liegt zum einen in der verwendeten Beleuchtungsoptik, welche in die SYRUSpro 1100 eingebaut ist. Verursacht wird dies durch ein deutlich geringeres Intensitätsspektrum der Lampe im Bereich 400 - 450 nm, verbunden mit höheren relativen Schwankungen (Abbildung A.12(b)). Eine weitere Ursache findet sich in geringfügig größeren Abweichungen der optischen Konstanten im Vergleich zu den theoretischen Werten in diesem Bereich. Die damit verbundenen kritischen Abweichungen sind nicht nur zwischen T_s und T_g zu finden, sondern auch zwischen T_g und T_f . Da dieser Effekt in der Simulation nicht auftritt, aber die Reoptimierungsroutine beeinflusst, wurde festgelegt den Wellenlängenbereich zu verkürzen.

In jeder Schicht, in der die Reoptimierung zugelassen wird, erfolgt zunächst die Entscheidung, ob die beobachtbare Abweichung zwischen dem Sollspektrum T_s und dem tatsächlichen Spektrum T_g messbar ist. Liegt die Abweichung unterhalb einer

vorgegebenen Nachweisgrenze, wird ohne Schichtdickenanpassung die nächste Schicht abgeschieden. Ist die messbare Diskrepanz deutlich größer als die Messungenauigkeit, wird untersucht, wie gut das mittels OptiMon modellierte Spektrum T_f mit dem tatsächlichen Spektrum T_g übereinstimmt. Lässt sich das gemessene/simulierte Spektrum gut modellieren, wird die Reoptimierung gestartet. Neben dem Fall der Schichtdickenanpassung wird zusätzlich das unveränderte System weiter betrachtet, da bei Änderung der Schichtdicke auch die Stabilität des Designs verringert werden kann, was zur Verschlechterung der Gutausbeute führen könnte. Auf diese Weise entsteht ein Vielweltenproblem, welches maximal aus 2^N Möglichkeiten bestehen kann, wobei N die Anzahl der Schichten angibt, bei der die Reoptimierung erlaubt ist. Bei zu großer Diskrepanz zwischen Modell und tatsächlichem Spektrum ist eine optische Abscheidung nicht mehr sinnvoll, da dies in einer systematischen Abweichung der Schichtdicke von der Solldicke resultieren würde. Die nächste Schicht wird somit anschließend mit Schwingquarzkontrolle ohne Schichtdickenanpassung fortgeführt.

Als Nachweisgrenze wird die k -fache Standardabweichung festgelegt, bezogen auf die Fluktuationen der mittels OptiMon ermittelten Transmissionsspektren (Abbildung A.14). Ist die Abweichung zwischen den beiden betrachteten Spektren in M aufeinander folgenden Messpunkten größer, als die k -fache Standardabweichung, kann dies nicht mehr durch statistische Schwankungen verursacht werden. Für beide Nachweisgrenzen werden die Parameter M und k unabhängig voneinander vom Benutzer festgelegt.

Für die Schichtdickenanpassung wird das Programm OptiLayer [Tika] herangezogen. Unter Verwendung der theoretischen optischen Konstanten und der mit Hilfe der OptiMon Software gemittelten physikalischen Dicken der bereits abgeschiedenen Schichten, werden die Schichtdicken des verbleibenden Systems angepasst. Im Idealfall kann trotz aufgetretener Abscheidefehler das Mehrschichtsystem soweit geändert werden, dass die Spezifikationen erfüllt werden. Bei zu großer Abweichung vom Modell ist die Reoptimierung jedoch zu vermeiden, da durch entstehende systematische Fehler die optische Performance verschlechtert werden könnte.

Betrachtet man das “Vielweltenproblem“, welches sich jeweils durch die beiden möglichen Pfade in der Simulation (Abbildung 4.5) ergibt, so werden die optischen Konstanten einer Schicht unabhängig von der Abscheidestrategie festgelegt. Alle Designs eines Durchlaufs besitzen in den jeweiligen Schichten die selben optischen Konstan-

ten. Abweichungen treten nur in der Solldicke und der Abscheidestrategie auf, was sich in den simulierten physikalischen Dicken der Schichten widerspiegelt.

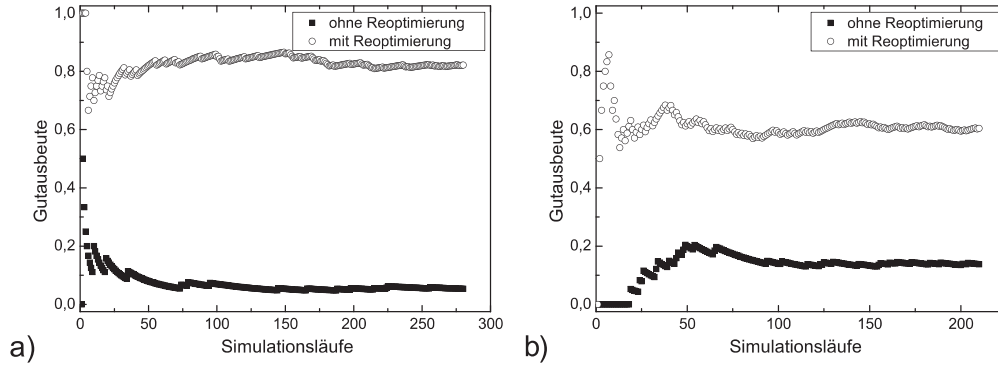


Abbildung 4.6.: Gutausbeuten mit und ohne Reoptimierung zum Vergleich für a) Abscheidung mittels OptiMon 3.14 und b) mit Schwingquarz

Ausgehend von den Simulationsergebnissen der Reoptimierungsroutine lassen sich Informationen erhalten, an welchen Schichten die Reoptimierung eine Erhöhung der Gutausbeute mit sich ziehen kann, beziehungsweise wann man die Schichtdickenanpassung vermeiden sollte. Mit Hilfe dieser Aussagen lässt sich entscheiden, welche Schichten bei der tatsächlichen Abscheidung für die Reoptimierung zugelassen werden.

Die Gutausbeuten des Strahlteilers als Funktion der Simulationsanzahl sind für beide Abscheidestrategien in Abbildung 4.6 mit und ohne Reoptimierung dargestellt. Untersuchungen zum Einfluss verschiedener für die Reoptimierung zugelassener Schichten haben gezeigt, dass eine Anpassung der verbleibenden Schichten erst nach der zweiten Schicht sinnvoll ist. Um die Übersicht zu wahren, sind in Abbildung 4.6 nur die Ergebnisse ohne Reoptimierung und für die Schichtdickenanpassung ab der zweiten Schicht dargestellt.

Abbildung 4.6b) zeigt die Resultate der virtuellen Schwingquarzkontrolle ohne und mit Reoptimierung. Durch die Schichtdickenanpassung lässt sich die Gutausbeute theoretisch von 14% auf 60% erhöhen. Die Simulationsergebnisse bei Monitoring mit OptiMon 3.14 sind vergleichend in Abbildung 4.6a) zu sehen. Auch in diesem Fall erhält man durch Reoptimierung nach den Schichten 2 bis 8 eine Erhöhung der Gutausbeute von 5% auf 82%. Zusätzlich geht hervor, dass auf Grund der Abweichung

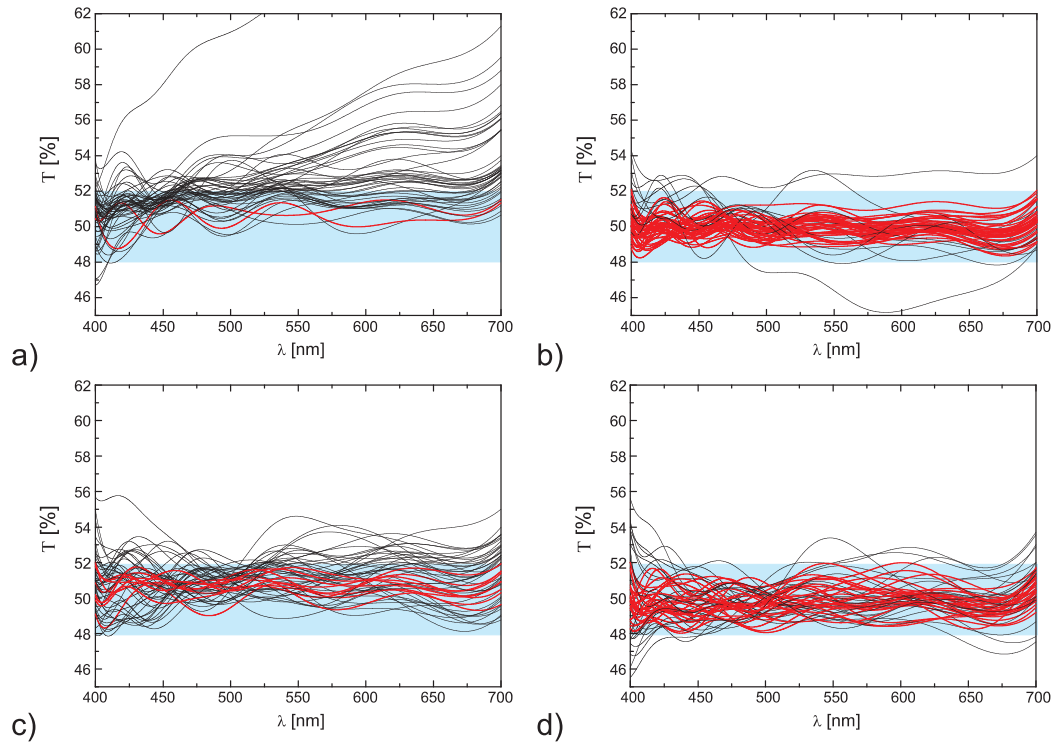


Abbildung 4.7.: Simulationen des Strahlteilers unter Verwendung von OptiMon 3.14
a) ohne und b) mit Reoptimierung, sowie bei Schwingquartzabscheidung c) ohne und d) mit Reoptimierung. Rote Transmissionspektren stellen erfolgreiche Simulationen und der hellblau unterlegte Bereich das erlaubte Transmissionsvermögen dar.

zwischen tatsächlichem und modelliertem Spektrum in 90% aller Simulationenläufe auf Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz übergegangen wurde. Dabei ist zu erwähnen, dass in 30% der Fälle in einer späteren Schicht die Abschaltung mit OptiMon wieder zugelassen wurde.

Zum besseren Vergleich des Einflusses der Reoptimierung auf die Transmissionspektren sind die ersten 50 Simulationsergebnisse in Abbildung 4.7 dargestellt. Abscheidefehler zeigen sich in einer Erhöhung der Transmission. Ohne Reoptimierung zeigt die Simulation ein ernüchterndes Ergebnis. Für den Strahlteiler ist somit die Reoptimierung angebracht. Aufgetretene Fehler können korrigiert werden, was zu einer Verringerung der Transmissionswerte führt. Dies verursacht die deutliche Änderung der Gutausbeute. Im Fall der BBM zeigt sich, dass die Abscheidung des Strahlteilers sehr anfällig auf Fehler in den optischen Konstanten ist. Dies erklärt die wesentlich höheren Schwankungen zwischen den Transmissionspektren im Fall der BBM im Vergleich zu den Spektren bei Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz.

4.2.2. Experimentelle Ergebnisse

Ausgehend von den Simulationsergebnissen wurde festgelegt, dass die Reoptimierung ab der zweiten Schicht zugelassen werden soll. Abbildung 4.8 zeigt die Transmissionspektren der beschichteten Strahlteiler ohne und mit Anwendung der Schichtdickenanpassung, wobei im Fall der Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz nur Experimente dargestellt sind, wo der in-situ kalibrierte Schwingquarz verwendet wurde.

Man erkennt zunächst deutlich, dass alle Versuche ohne Reoptimierung den erlaubten Bereich von $(50 \pm 2) \%$ überschreiten und somit als Fehlversuche gelten. Sowohl bei Schichtdickenkontrolle mit Schwingquarz, als auch bei BBM ändert sich die optische Performance durch die Reoptimierung. Eine direkte Besserung ist jedoch nicht sichtbar. Deutliche Abweichungen treten zwischen den mittels OptiMon modellierten und den gemessenen Spektren auf. Damit verbunden kam es zu offensichtlichen Diskrepanzen zwischen der Schichtdicke zum Abschaltzeitpunkt und der gemittelten physikalischen Dicke.

Vermutet wurde ein Drift in den optischen Konstanten Brechungsindex und Extinktionskoeffizient. Daher wurde nach dem Wechsel der Plasmakathode ein zusätzlicher Versuch durchgeführt, der in Abbildung 4.8b) grün dargestellt ist. Man erkennt ei-

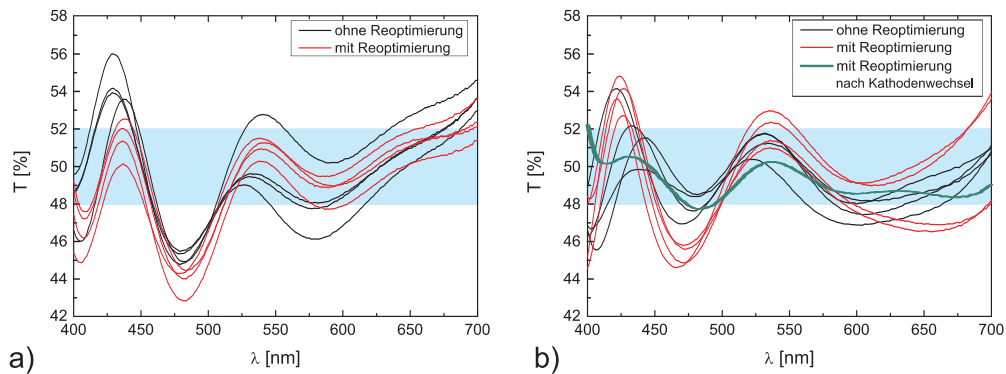


Abbildung 4.8.: Transmissionsspektren der Strahlteiler für Schichtdickenkontrolle mit a) Schwingquarz und b) OptiMon 3.14. Der blau unterlegte Bereich entspricht der erlaubten Transmission.

ne deutlich bessere spektrale Charakteristik, die Spezifikation wird nur noch knapp verfehlt.

4.2.3. Diskussion

Nutzen und Einfluss der Reoptimierungsroutine konnten zunächst auf Basis der Simulationen aufgezeigt werden, wobei durch die Anpassung von gezielt ausgewählten Schichten die resultierende Gutaussbeute drastisch erhöht wurde. Die Simulationsergebnisse und die durchgeführten Experimente weisen jedoch starke Abweichungen auf. Die ermittelte Gutaussbeute gibt die experimentellen Ergebnisse ohne Reoptimierung gut wieder, man erkennt jedoch eine deutliche Diskrepanz der spektralen Verläufe zwischen Simulation und Experiment.

Diese Abweichungen können auf zahlreiche Ursachen zurückgeführt werden. Zunächst ist zu erwähnen, dass in den Experimenten die Drehgeschwindigkeit der Kalotte 70% der Geschwindigkeit entspricht, welche in den Simulationen angenommen wurden. Dadurch resultieren in der Simulation geringere angenommene Fehler bezüglich der Schichtdicke, als in den Experimenten tatsächlich auftraten. Die Kalottendrehung wurde verringert, da es Probleme mit der Kommunikation zwischen der OptiMon Software und der Anlagensteuerung gab. Ein weiterer Effekt findet sich in der Diskrepanz zwischen dem Abschaltzeitpunkt, welcher durch die OptiMon Software festgelegt wird und der tatsächlichen Abschaltung durch die Anlagensteuerung.

Damit verbunden kommt es zu tendenziell größeren Schichtdicken. In der Simulation entspricht das Ende der Beschichtung dem festgelegten Abschaltsignal von OptiMon.

Der Einfluss der beiden beschriebenen Effekte ist jedoch vernachlässigbar in Bezug auf die Wirkung falsch angenommener optischer Konstanten. Bei den durchgeführten Beschichtungsexperimenten war beobachtbar, dass stets deutliche Abweichungen zwischen modelliertem und tatsächlichem Spektrum auftraten. Das legt die Vermutung nahe, dass dieser Effekt auf falsch angenommene optische Konstanten zurückzuführen ist. Im Fall von Ta_2O_5 und Nb_2O_5 -Schichten war diese Diskrepanz besonders stark ausgeprägt. Ein direkter Vergleich der optischen Konstanten von Ta_2O_5 vor und nach dem Wechsel der Plasmakathode zeigen den Einfluss der Kathodenalterung. Dies ist in Abbildung 4.9 dargestellt. Man erkennt deutlich, dass eine Kathode, welche am Ende ihrer Lebenszeit ist, die Eigenschaften des verdampften Materials deutlich anders beeinflusst, als eine Neue. Die Schichten besitzen höhere Verluste als in den Fällen der neuen Kathode und den Versuchen zur Reproduzierbarkeit.

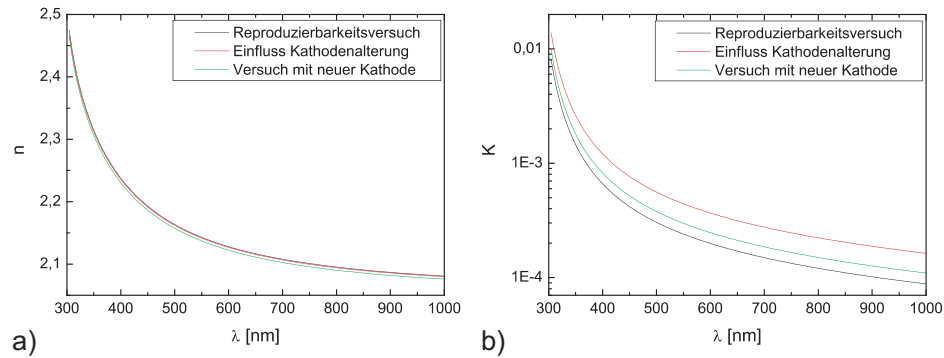


Abbildung 4.9.: Vergleich der optischen Konstanten a) Brechungsindex und b) Extinktionskoeffizient der Ta_2O_5 -Einzelschichten vor und nach dem Plasmakathodenwechsel, sowie der Reproduzierbarkeitsversuche.

Auf Grund der Kathodenalterung treten Diskrepanzen zwischen den tatsächlichen und den angenommenen optischen Konstanten auf. Die daraus resultierenden Abweichungen sind deutlich höher als in der Simulation und tragen systematischen Charakter. Das zur Schichtdickenanpassung verwendete Programm rechnet ebenfalls mit den falsch angenommenen optischen Konstanten, was dazu führen kann, dass durch die Reoptimierung unter Umständen die spektrale Charakteristik sogar verschlechtert

werden könnte. Ein zusätzlicher optisch breitbandig monitorierter Beschichtungsversuch des Strahlteilers unter Anwendung der Reoptimierung wurde nach dem Kathodenwechsel durchgeführt. Dies ist in Abbildung 4.8 dargestellt und zeigt eine deutlich bessere Performance und belegt damit den Einfluss der Kathodenalterung auf die Versuche und den Nutzen der Reoptimierung.

Die falsch angenommenen optischen Konstanten verursachen nicht nur eine andere spektrale Charakteristik des Strahlteilers, sondern können Fehler in den durch in-situ Kalibrierung ermittelten Solldicken hervorrufen. Nur unter der Voraussetzung absolut reproduzierbarer Bedingungen ist die Reoptimierung sinnvoll und bietet in diesem Fall die Möglichkeit den Ausschuss deutlich zu reduzieren und somit Fehlchargen zu vermeiden.

Die Reoptimierung ist in der Praxis der plasmagestützten Verdampfung nur im Notfall anzuwenden, wenn ein absehbar fehllaufender Beschichtungsversuch eventuell noch gerettet werden kann. Absoluten Vorrang haben hingegen die Anstrengungen zur Einrichtung stabiler Prozessbedingungen. Sie reduzieren die Notwendigkeit, auf Reoptimierungsroutinen zurückgreifen zu müssen. Sollte die Reoptimierung doch nötig sein, so erhöht sich die Erfolgsaussicht.

5. Diskussion und Schlussfolgerungen

5.1. Bewertung der Modellvorstellung

Jeder Nutzer eines Programms zur computergestützten Simulation muss sich bewusst sein, dass die Simulation stets nur so gut ist, wie die Anwendbarkeit des verwendeten Modells und die genutzten Eingabedaten, welche für das Programm vorausgesetzt werden. Um eine Bewertung eines Modells durchzuführen, ist es somit unerlässlich, sich kritisch mit den verwendeten Modellannahmen und den Inputparametern auseinanderzusetzen.

Je genauer man die Simulation gestalten will, desto komplizierter wird das verwendete Modell. Dies hat jedoch zur Folge, dass mehr Parameter zur Beschreibung nötig sind, was die Komplexität der Beziehungen und Effekte der Parameter deutlich erhöht. Je komplexer das Modell wird, desto schwierig wird die Bestimmung und Zuordnung der Ursachen und Wirkungen beobachtbarer Effekte. Demnach war es das Ziel dieser Arbeit ein Modell zu begründen, welches alle ausschlaggebenden Parameter berücksichtigt, ohne auf Grund zu hoher Komplexität den Nutzer zu überfordern.

Es wurde ein einfaches Modell erstellt, welches Schwankungen in Schichtdicken und optischen Konstanten auf Grund prozesstypischer Abscheidefehler berücksichtigt, wobei die herangezogenen Effekte abhängig sind von den Prozessbedingungen und der gewählten Abschaltmethode.

Das während dieser Arbeit begründete Modell setzt Annahmen voraus, welche für die weitere Betrachtung homogene, glatte Schichten voraussetzen. Untersuchungen bezüglich dieser Eigenschaften sollten zeigen, in wieweit diese Annahmen gerechtfertigt sind.

Sowohl aus den Röntgenreflektometriemessungen der Einzelschichten, als auch der Vermessung der beiden Mehrschichtsysteme lässt sich schließen, dass die Annahme der Vernachlässigung der Rauheiten begründet ist. Die in diesen Fällen auftretenden rms-Rauheiten liegen deutlich unterhalb der Wellenlängenbereiche der Spezifikationen.

Daher kann davon ausgegangen werden, dass der Einfluss der Rauheiten in diesen Fällen vernachlässigt werden kann.

Inhomogene Brechzahlprofile konnten durch geeignete Wahl der Prozessparameter vermieden werden. Auf Grund der guten Übereinstimmung der mittels LCalc angepassten Spektren, unter Voraussetzung homogener Schichten, und der gemessenen Einzelschichten kann davon ausgegangen werden, dass der Einfluss möglicher Inhomogenitäten und der prozesstypischen Schwankungen nicht unterschieden werden können. Das Modell homogener Schichten kann somit zur Beschreibung dieser Systeme verwendet werden.

Der Einfluss des thermischen Shifts und des Vakuum-Luft-Shifts ist im Modell implementiert. Für die in den Versuchen und Simulationen betrachteten Materialien lagen mögliche Shifteffekte innerhalb der messbedingten Schwankungen, wodurch diese in den Simulationen nicht berücksichtigt werden.

Unter Betrachtung der messbedingten zufälligen Fehler bei der Messung der Spektren wurden die Schwankungen der optischen Konstanten korrigiert. Dies führte zu dem Ergebnis, dass nur im Fall von SiO_2 die Variationen der optischen Konstanten außerhalb der messbedingten Schwankungen lagen.

Auf Grund der durchgeführten Versuche zur Reproduzierbarkeit ist es möglich, eine gute Vorstellung der prozesstypischen Schwankungen zu erhalten. Um eine statistisch fundierte Aussage treffen zu können, wären jedoch mehr Versuche notwendig. Da es das Ziel der Arbeit war, ein Dünnschichtmodell zu erstellen und nicht die prozesstypischen Schwankungen so genau wie möglich zu bestimmen, wurde entschieden, 5 bis 10 Versuche für jede Solldicke durchzuführen. Die ermittelten Standardabweichungen wurden entsprechend der Fehlerbetrachtung stets aufgerundet, womit die Simulationsergebnisse eine Art Größtfehlerabschätzung darstellen.

Die Untersuchungen bezüglich der Modellannahmen haben gezeigt, dass im Rahmen der verwendeten Materialien, der Abschaltstrategien und der Prozessbedingungen die festgelegten Annahmen gerechtfertigt sind. Die Fluktuationen der optischen Konstanten werden sehr genau wiedergegeben, genau wie die Schwankungen der Schichtdicke bei BBM. Dies ist auf eine sehr gute Beschreibung der Variationen der gemessenen Intensitätsspektren zurückzuführen. Die simulierten Schwankungen der physikalischen Dicke im Fall der Schichtdickenkontrolle mit Schwingquarz sind zu groß angenommen, woraus man schließen kann, dass die Schwankungen der vermessenen Einzelschichten

nicht auf Mehrschichtsysteme übertragbar sind. Dieser Effekt ist nicht auf das Modell zurückzuführen, sondern auf die Inputdaten. Trotz dieser Abweichung erhält man bereits einen guten Eindruck der anstehenden Beschichtung und der damit maximal verbundenen Schwankungen auf Grund zufälliger Fehler.

Im Laufe dieser Arbeit wurde ein sehr nützliches Werkzeug erstellt, welches zur Untersuchung möglicher Designs und Abschaltstrategien dient. Es lassen sich durch virtuelle Beschichtungen die Stabilität, die Erfolgsaussicht und kritische Schichten bestimmen. Auf diese Weise lässt sich bereits durch Vorauswahl der Systeme der Ausschuss deutlich reduzieren und auch die damit verbundenen Kosten.

Im Fall der untersuchten AR-Designs war in den Simulationen bereits ersichtlich, dass das zweite Design mit der OptiMon Version 3.5 nicht abscheidbar ist. An Hand der Untersuchungen und erhaltenen Ergebnisse wurde das Programm OptiMon verändert, mit dem Resultat, dass AR-Design 2 mit OptiMon 3.14 optisch sehr gut abscheidbar ist.

Da sowohl die Simulation, als auch die Anpassung der OptiMon Software an der verwendeten Anlage sich stetig entwickeln, kann es zu Diskrepanzen in den verwendeten Rechenkernen und Abschaltalgorithmen kommen.

5.2. Schlussfolgerungen für die Beschichtungspraxis

An einer Vielzahl an Literaturquellen, wie beispielsweise [Tik05] und [Tho82], ließ sich der Nutzen virtueller Prozessläufe belegen. Die dabei verwendeten Modelle und Annahmen unterscheiden sich teilweise sehr stark. Trotz dessen war in allen Fällen das Ziel erkennbar, Beschichtungsprozesse von Mehrschichtsystemen zu simulieren für die Auswahl geeigneter Designs und Abschaltstrategien.

Das erstellte Werkzeug, zur Simulation von Beschichtungsprozessen unter Verwendung des begründeten Modells, berücksichtigt prozesstypische Abscheidefehler durch Schwankungen in den optischen Konstanten, wobei das Multioszillatormodell verwendet wird und die physikalischen Dicken der abgeschiedenen Schichten. Es steht somit ein Simulationstool zur Verfügung, welches zur Untersuchung der Stabilität und der Bestimmung der Erfolgsaussichten verwendet werden kann. Ein Vorteil der Simulation gegenüber konventioneller Beschichtung findet sich darin, dass die Simulation nur einen Bruchteil der Beschichtungszeit benötigt. Dies führt dazu, dass im Vorfeld der Beschichtung eine statistisch relevante Anzahl an virtuellen Beschichtungen durch-

geführt werden kann. Zusätzlich fallen auf diese Weise keine Kosten auf Grund des Verdampfungsprozesses und der verwendeten Materialien an. Dieses Werkzeug bietet somit eine kostengünstige Alternative zu sonst durchzuführenden Vorversuchen.

Durch Auswahl geeigneter Designs lassen sich bereits im Vorfeld die Erfolgsaussichten der Versuche drastisch steigern, so dass der bei konventioneller Beschichtung auftretende Ausschuss durch Simulationen der Beschichtungsprozesse verringert werden kann. Dies führt ebenfalls zum Einsparen von Produktionskosten und zur Verringerung der Produktionszeiten.

Mit Hilfe der Simulationsergebnisse lässt sich der Nutzen der in-situ Kalibrierung des Schwingquarzes belegen. Der Vergleich zwischen virtuellen und realen Beschichtungen zeigt eine deutliche Konsistenz der spektralen Charakteristiken. Damit ist das optische breitbandige Monitoriersystem sowohl aktiv (BBM) als auch passiv (in-situ kalibrierter Schwingquarz) ein sehr nützliches Werkzeug.

Auf Grund der stets auftretenden statistischen Schwankungen und den damit verbundenen Fehlversuchen wurde zusätzlich ein Algorithmus entwickelt, welcher während der virtuellen Beschichtung den Einfluss der Schichtdickenanpassung verbleibender Schichten untersucht und damit einen Mechanismus zur Fehlerkompensation darstellt. Er dient nicht nur zur Bestimmung der Gutausbeutenerhöhung, sondern klärt auch nach welchen Schichten die Reoptimierung sinnvoll ist. Trotz allem sollte die Reoptimierung nur im Notfall durchgeführt werden. Die damit erhaltenen Schichtdicken des verbleibenden Designs bringen nur dann eine Besserung der spektralen Charakteristik mit sich, wenn die bereits gemachten Abscheidefehler richtig interpretiert werden.

Wie an den Versuchen des Strahlteilers deutlich war, ist die genaue Kenntnis der optischen Konstanten der verwendeten Materialien von Bedeutung. Da auf Grund der Kathodenalterung die angenommenen optischen Konstanten deutlich von den tatsächlichen abweichen, ist ein Wechsel der Plasmakathode zu einem wesentlich früheren Zeitpunkt nötig, um die Konsistenz zwischen angenommenen und tatsächlichen optischen Konstanten gewährleisten zu können.

Sowohl der Algorithmus zur Reoptimierung bei virtuellen Prozessläufen, als auch bei Beschichtungsversuchen ist eine deutliche Verbesserung der adaptiven gegenüber der konventionellen Fertigungskette. Durch Verringerung des Ausschusses lassen sich auch in diesem Fall Produktionskosten und -zeiten deutlich reduzieren.

Bei Verwendung beider Werkzeuge muss sich der Nutzer stets im Klaren sein, dass für das angesetzte Modell systematische Fehler vorgehalten werden und diese damit in den Simulationen nicht berücksichtigt werden. Es wurde bereits in [Tik06] gezeigt, dass systematische Fehler einen bedeutenden Einfluss haben, welcher nicht zu vernachlässigen ist. Bei Kenntnis der systematischen Fehler, können diese jedoch vorgehalten werden.

Das während dieser Arbeit erstellte Werkzeug für virtuelle Beschichtungsprozesse, sowie die Reoptimierungsroutine stellen den ersten und dritten Pfeiler des Verbundprojektes Tailored Automated Coating dar zur Begründung einer adaptiven Fertigungskette. Damit verbunden lassen sich viele Vorteile gegenüber der konventionellen Fertigung finden, welche bereits ausführlich dargestellt wurden. Beide Werkzeuge haben sich bereits jetzt als sehr nützliche Hilfsmittel in der Beschichtungspraxis bewiesen.

Anhang A.

Reproduzierbarkeitsversuche

A.1. Vermessung der Einzelschichten

A.1.1. Transmissionsspektren

Im folgenden werden die gemessenen Transmissionsspektren der Reproduzierbarkeitsversuche der Materialien Nb_2O_5 , Ta_2O_5 und TiO_2 für jeweils eine Solldicke dargestellt.

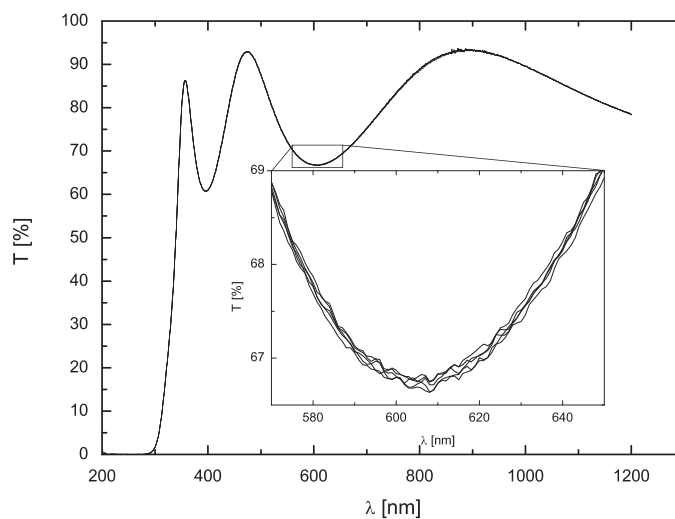


Abbildung A.1.: Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionsspektren der Einzelschichten des Materials Nb_2O_5 für Solldicke 200 nm

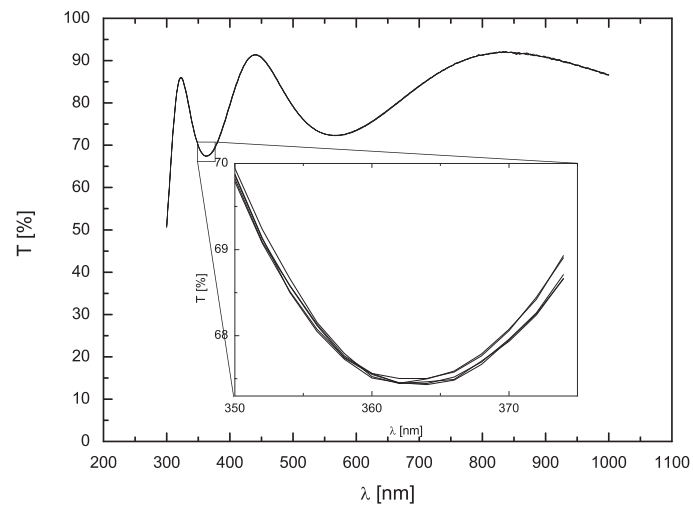


Abbildung A.2.: Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionspektren der Einzelschichten des Materials Ta_2O_5 für Solldicke 200 nm

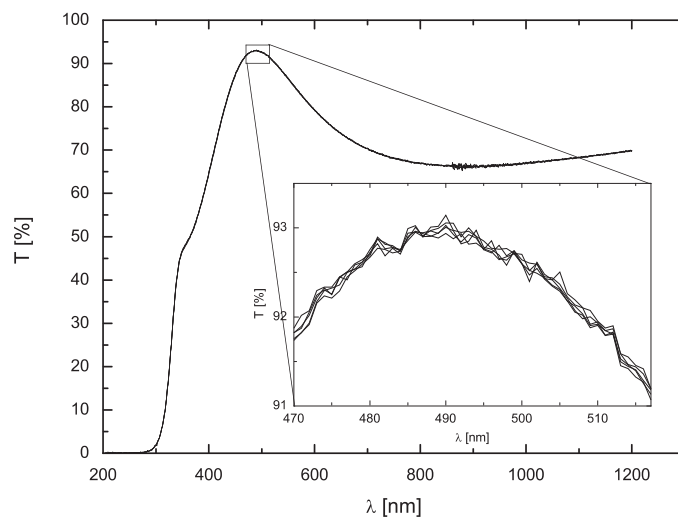


Abbildung A.3.: Versuche zur Reproduzierbarkeit: Transmissionspektren der Einzelschichten des Materials TiO_2 für Solldicke 100 nm

Die gemessenen Transmissionspektren einer ausgewählten Ta_2O_5 -Schicht mit Solldicke 200 nm sind in Abbildung A.4 zu sehen.

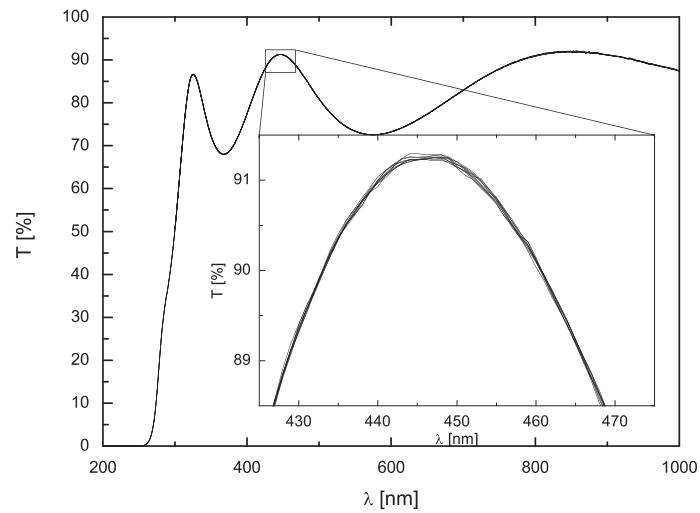


Abbildung A.4.: Transmissionspektren einer 10 mal vermessenen Ta_2O_5 mit Solldicke 200 nm als Funktion der Wellenlänge

A.1.2. Rauheitsmessungen

Die Messung der Intensitätsspektren der Einzelschichten als Funktion des Winkels 2θ sind für alle Materialien in Abbildung A.5 dargestellt, sowie die mittels GenX simulierten Spektren.

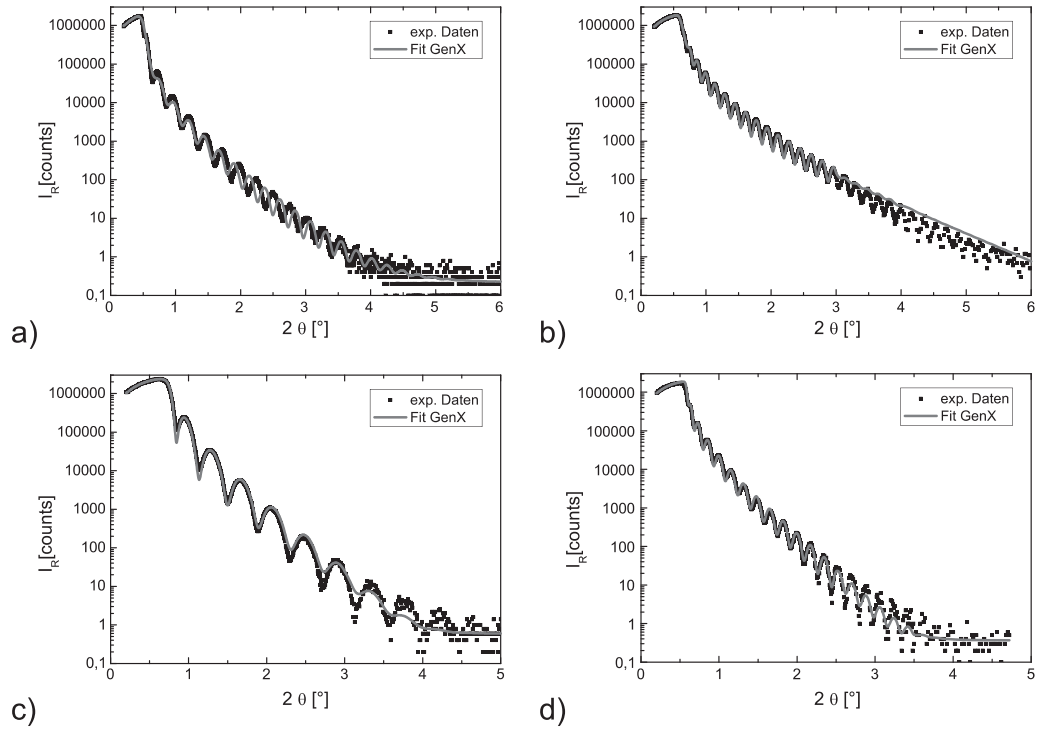


Abbildung A.5.: Gemessene (Punkte) und mittels GenX simulierte (Linie) Intensitätsspektren von a) SiO_2 , b) Nb_2O_5 , c) Ta_2O_5 und d) TiO_2

A.1.3. Shiftmessungen

Zur Untersuchung des Shift wurden Messungen der Transmission unter Luft bei Raumtemperatur und unter Vakuum bei 100° durchgeführt. Abbildung A.6 zeigt die Messergebnisse.

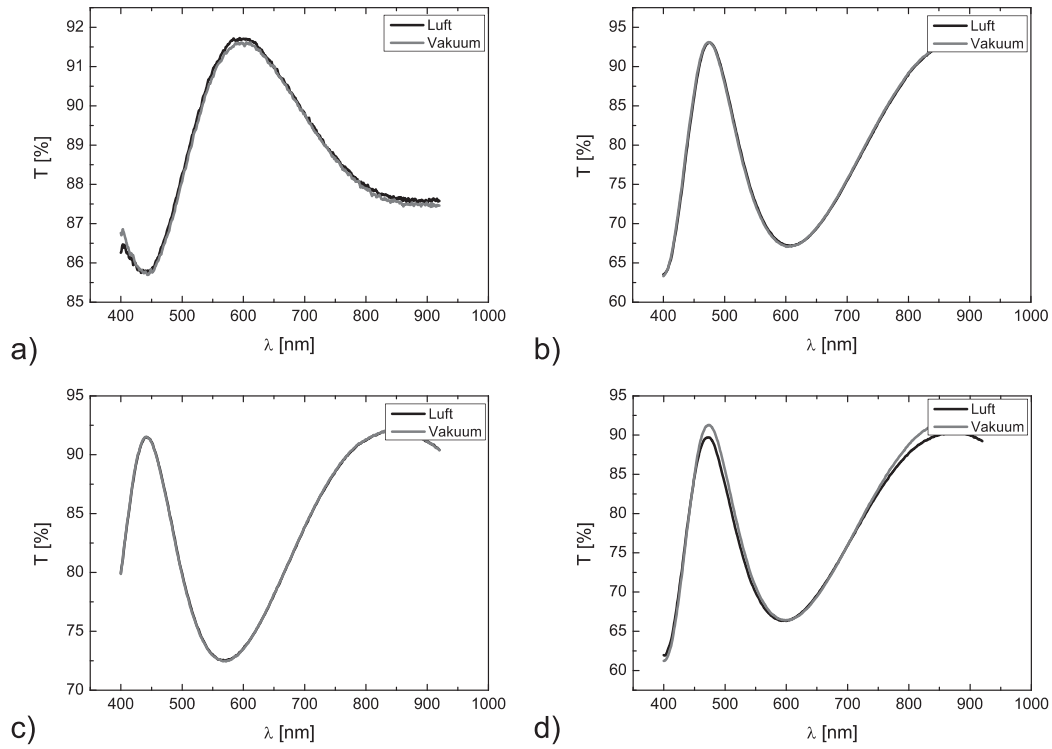


Abbildung A.6.: Transmissionsvermögen bei Messung unter Luft und Vakuum für a) SiO_2 , b) Nb_2O_5 , c) Ta_2O_5 und d) TiO_2

A.2. Auswertung der Reproduzierbarkeitsversuche

Im Modell wurde vorausgesetzt, dass Streueffekte vernachlässigt werden. Um dies experimentell verifizieren zu können, wurden Versuche zur Bestimmung der Oberflächenrauheit der Einzelschichten durchgeführt. Die Auswertung der Spektren erfolgte mit Hilfe des Programms GenX [Gen],[Bjö07], welches zur Anpassung von mittels Röntgenreflektometrie gemessener Intensitätsspektren dient.

Abbildung A.5 zeigt die gemessenen Intensitätsspektren (Punkte) und vergleichend dazu die mit Hilfe von GenX ermittelten Intensitätsverlauf (Linie). Die exponentielle Abnahme der Kurve, zur Ermittlung der Rauheit, wird sehr gut wiedergegeben. Die Anpassung der Oszillationen im Fall von SiO_2 gestaltet sich schwierig. Durch leichte Variation der Schichtdicke erkennt man eine Abhängigkeit zwischen dem Winkel 2Θ und der physikalischen Dicke. Dies lässt auf einen Schichtdickegradienten schließen. Die Ergebnisse, der mittels GenX ausgewerteten Messungen, sind zusammenfassend für alle untersuchten Materialien in Tabelle A.1 zu finden.

Material	Substrat	Dicke [nm]	rms-Rauheit [nm]	rms-Rauheit [nm] [Ste09b]
SiO_2	SF10	37,38	0,49	<1
Nb_2O_5	SQ1	50,16	0,37	1
Ta_2O_5	BK7	20,15	0,73	3
TiO_2	B270	48,35	1,03	

Tabelle A.1.: Schichtdicke und rms-Rauheit der mittels Röntgenreflektometrie vermessenen Einzelschichten

Bei Vergleich mit vorangegangenen Messungen der Materialien SiO_2 , Nb_2O_5 und Ta_2O_5 , welche in [Ste09b] veröffentlicht wurden, erkennt man dass die Rauheiten der hergestellten Einzelschichten bezogen auf die Größenordnung vergleichbar sind. Bei genauerer Betrachtung wird ersichtlich, dass die Einzelschichten der Reproduzierbarkeitsversuche geringere Rauheiten besitzen. Alle ermittelten rms-Rauheiten sind damit um zwei bis drei Größenordnungen niedriger, als die Wellenlängen der zur Vermessung der Spezifikationen verwendeten Strahlung. Man kann folglich davon ausgehen, dass der Einfluss der Oberflächenrauheit vernachlässigbar ist.

In dem begründeten Modell ist die Berücksichtigung des Shifts auf Grund der thermischen Ausdehnung und der Porosität der Proben möglich. An den plasmagestützten Einzelschichten wurden Shiftmessungen durchgeführt, welche in Abbildung A.6 dargestellt sind. Man erkennt, dass der Shift im Transmissionsspektrum für SiO_2 , Nb_2O_5 und Ta_2O_5 innerhalb der statistischen Schwankungen der Reproduzierbarkeitsversuche liegt.

Zur Auswertung der gemessenen Transmissionsspektren aus den Reproduzierbarkeitsversuchen wurde das Programm LCalc [LCa] verwendet, welches das Multioszillatormodell zur Bestimmung der Schichtdicke und der Oszillatorparameter von Einzelschichten heranzieht. Durch Variation der Oszillatorparameter und der Schichtdicke lässt sich das berechnete Transmissionsspektrum an das gemessene anpassen. SiO_2 , Nb_2O_5 und Ta_2O_5 wurden in einem Spektralbereich ausgewertet, bei dem die Absorption bei 200 nm Dicke 3% und im Fall von TiO_2 40% nicht überstieg. Damit verbunden ergibt sich die Anzahl der verwendeten Oszillatoren, um die Spektren möglichst genau anzupassen.

Vergleicht man gemessene und mittels LCalc angepasste Transmission einer SiO_2 -Einzelschicht mit 200 nm Solldicke, wie in Abbildung A.7 dargestellt, so erkennt man eine sehr gute Übereinstimmung. Dies impliziert die Konsistenz des Modells mit den Messergebnissen. Für die Auswertung werden homogene Brechzahlprofile vorausgesetzt. Da die Einzelschichten sehr genau angepasst werden können, ist die Festlegung homogener Brechzahlprofile im Modell gerechtfertigt. Inhomogenitäten sind innerhalb der Messungenauigkeit nicht nachweisbar.

Die Ergebnisse der Auswertung aller Reproduzierbarkeitsversuche sind in Tabelle A.2 zusammengefasst. Angegeben ist der ausgewertete Wellenzahlbereich, die Mittelwerte und Standardabweichungen der Oszillatorparameter, sowie die erhaltenen Schichtdickenschwankungen bei Schwingquarzabscheidung. Die vergleichbar starken Schwankungen der Schichtdicken im Fall von SiO_2 werden unter anderem auf hohe Ratenschwankungen zurückgeführt.

Die Abbildungen A.8 und A.9 verdeutlichen die erhaltenen Ergebnisse.

Um mögliche Abhängigkeiten zu berücksichtigen, wurden an allen Oszillatorparametern, mit Standardabweichungen größer 1%, einfache Korrelationsanalysen durchgeführt. Alle korrelierten Parameter sind in Abbildung A.10 dargestellt.

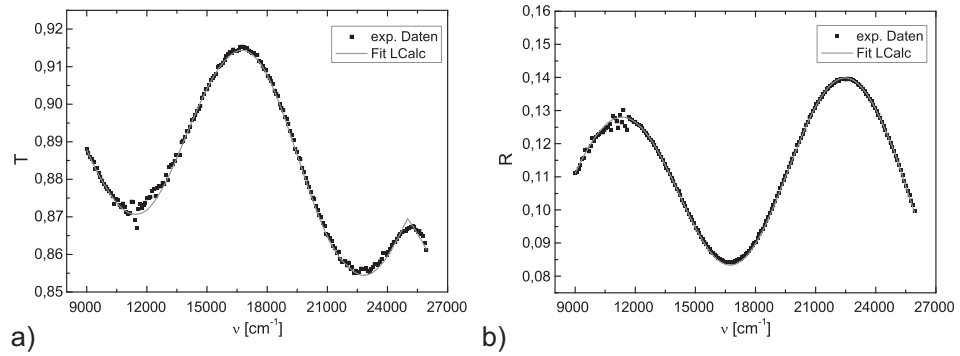


Abbildung A.7.: Vergleich der Transmission einer SiO_2 -Einzelschicht mit 200 nm Soll-dicke. Gemessenes (Punkt) und mittels LCalc angepasstes Spektrum (Linie).

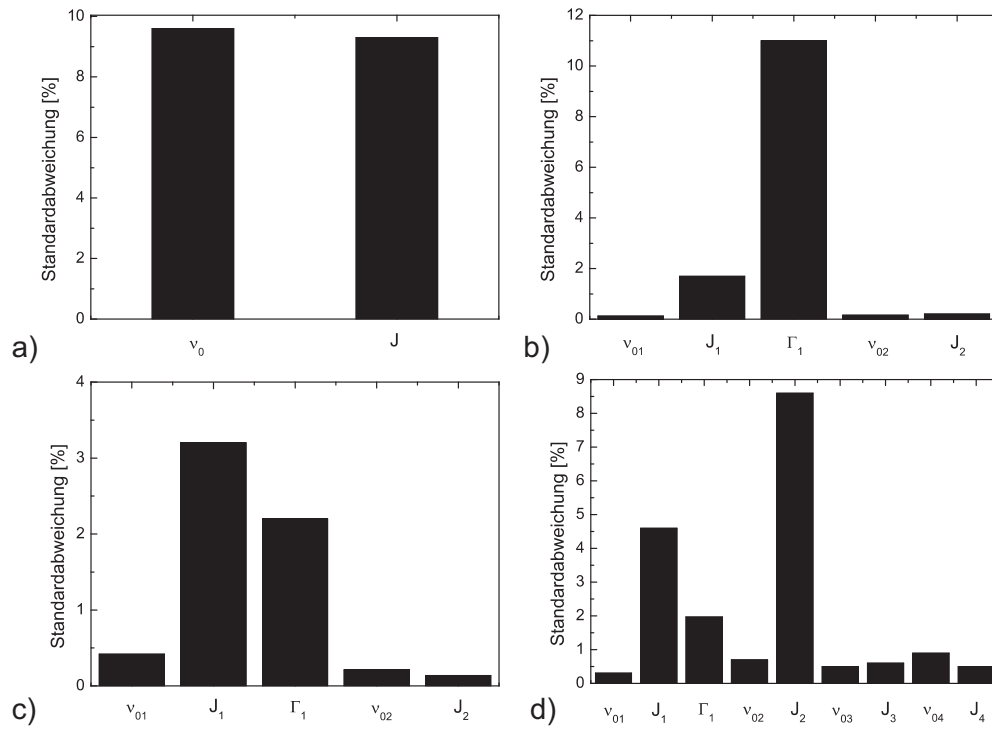


Abbildung A.8.: Prozentuale Standardabweichung der Oszillatorparameter bei Auswertung mittels LCalc von a) SiO_2 , b) Nb_2O_5 , c) Ta_2O_5 und d) TiO_2

Material	SiO ₂	Nb ₂ O ₅	Ta ₂ O ₅	TiO ₂
Wellenzahl	8500 - 27700 [cm ⁻¹]	8500 - 17700 [cm ⁻¹]	10000 - 30000 [cm ⁻¹]	8500 - 30000 [cm ⁻¹]
Oszillator- parameter	$osz + \Delta osz$ [cm ⁻¹]	$osz + \Delta osz$ [cm ⁻¹]	$osz + \Delta osz$ [cm ⁻¹]	$osz + \Delta osz$ [cm ⁻¹]
ν_{01}	94000 ± 9000	30250 ± 40	35810 ± 150	29000 ± 90
J_1	172000 ± 16000	5430 ± 90	4950 ± 160	1080 ± 50
Γ_1	0	54 ± 6	227 ± 5	810 ± 16
ν_{02}	-	51080 ± 80	58730 ± 130	30400 ± 210
J_2	-	288300 ± 600	289700 ± 400	2330 ± 200
Γ_2	-	0	0	0
ν_{03}	-	-	-	33430 ± 160
J_3	-	-	-	33310 ± 210
Γ_3	-	-	-	0
ν_{04}	-	-	-	55400 ± 500
J_4	-	-	-	281000 ± 1400
Γ_4	-	-	-	0
Schichtdicke	$d + \Delta d$ [nm]	$d + \Delta d$ [nm]	$d + \Delta d$ [nm]	$d + \Delta d$ [nm]
	30,0 ± 0,7 200,0 ± 1,2 300,0 ± 2,3	200,0 ± 0,6 300,0 ± 0,6	20,0 ± 0,1 200,0 ± 1,0 500,0 ± 2,0	50,0 ± 0,6 100,0 ± 0,7 200,0 ± 1,0

Tabelle A.2.: Ergebnisse der Reproduzierbarkeitsversuche: Ausgewerteter Wellenzahlbereich, Mittelwert osz und Standardabweichung Δosz der Oszillatorparameter, sowie Standardabweichung der Schichtdicke Δd für die Soll-dicke d nach Schichtdickenkontrolle mittels Schwingquarz.

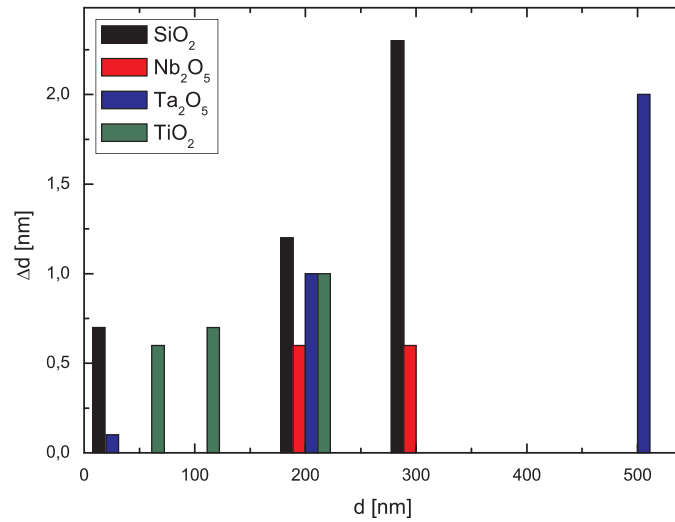


Abbildung A.9.: Schichtdickenschwankungen der Versuche zur Reproduzierbarkeit bei Kontrolle mittels Schwingquarz für verschieden Solldicken

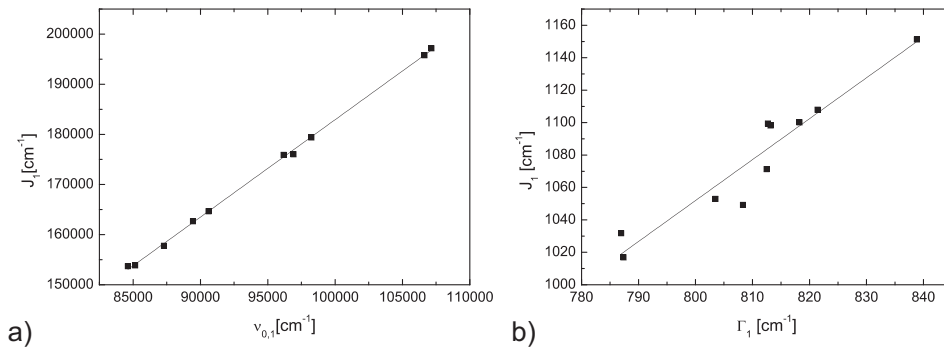


Abbildung A.10.: Vorhandene Korrelationen der Oszillatorparameter für a) SiO₂ und b) TiO₂

Ausgehend von den Transmissionsspektren wurden die Schwankungen der optischen Konstanten ermittelt, welche in Abbildung A.11 zu sehen sind.

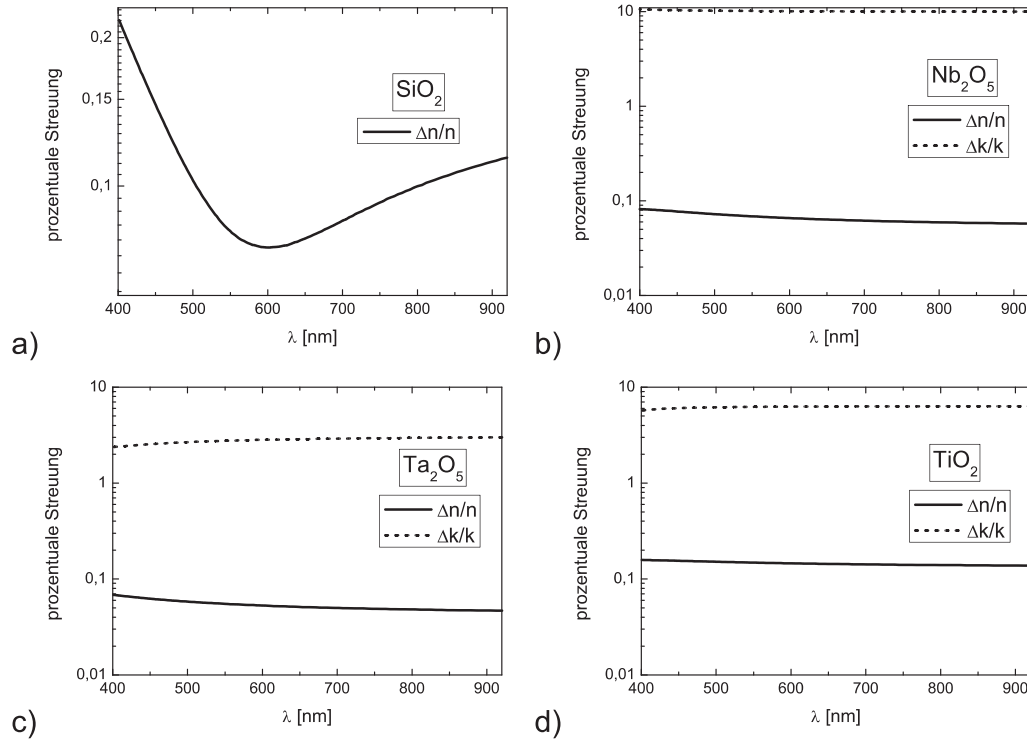


Abbildung A.11.: Relative Schwankungen der optischen Konstanten von a) SiO_2 , b) Nb_2O_5 , c) Ta_2O_5 und d) TiO_2

Zur Bestimmung der zufälligen messbedingten Fehler, wurde jeweils eine Einzelschicht SiO_2 und Ta_2O_5 10 mal vermessen, um die Schwankungen in den Oszillatorparametern zu bestimmen. Die Standardabweichungen der Oszillatorparameter sind in Tabelle A.3 zusammengefasst. Bei Vergleich mit Tabelle A.2 wird deutlich, dass die prozesstypischen Schwankungen der optischen Konstanten bei Ta_2O_5 innerhalb der zufälligen Messfehler liegen. Dies gilt analog für Nb_2O_5 und TiO_2 . Im Fall von SiO_2 , liegen die Abscheidefehler deutlich außerhalb der zufälligen messbedingten Schwankungen. Im Modell werden folglich nur Fluktuationen in den optischen Konstanten von SiO_2 berücksichtigt.

Material	SiO ₂	Ta ₂ O ₅
Oszillatorparameter	Δosz [cm ⁻¹]	Δosz [cm ⁻¹]
ν_{01}	5000	90
J_1	10000	250
Γ_1	0	4
ν_{02}	-	100
J_2	-	400
Γ_2	-	0

Tabelle A.3.: Schwankungen der Oszillatorparameter auf Grund der zufälligen messbedingten Fehler für SiO₂ und Ta₂O₅

Beobachtbare Schwankungen auf Grund von Abscheidefehlern und der zufälligen messbedingten Fehler sind unabhängig voneinander. Dies erlaubt die Abschätzung der Standardabweichung $\Delta osz_{\text{Abscheidefehler}}$ auf Grund von prozesstypischen Abscheidefehlern ausgehend von den ermittelten Standardabweichungen des Messfehlers Δosz_{Mess} und der Reproduzierbarkeitsversuche $\Delta osz_{\text{Repro}}$, welche Abscheide- und Messfehler beinhalten.

$$\Delta osz_{\text{Abscheidefehler}} = \sqrt{\Delta osz_{\text{Repro}}^2 - \Delta osz_{\text{Mess}}^2} \quad (\text{A.1})$$

Aus den Versuchen zur Bestimmung der Messungenauigkeit folgt, dass die Schwankungen in der physikalische Dicke der Einzelschichten bei Kontrolle mit Schwingquarz vollständig auf Abscheidefehler zurückgeführt werden können. Die physikalischen Dicken der abgeschiedenen Schichten für jedes Material lassen sich durch eine Regressionsgerade entsprechend Gleichung (2.32) beschreiben. Unter Vorbehalt systematischer Fehler erhält man

- SiO₂: $d_{\text{sim}} = (1,0000 \pm 0,004) \cdot d_{\text{soll}} + (0 \pm 1)\text{nm}$
- Nb₂O₅: $d_{\text{sim}} = d_{\text{soll}} + (0,0 \pm 0,6)\text{nm}$
- Ta₂O₅: $d_{\text{sim}} = (1,0000 \pm 0,0013) \cdot d_{\text{soll}} + (0,0 \pm 0,4)\text{nm}$
- TiO₂: $d_{\text{sim}} = (1,000 \pm 0,002) \cdot d_{\text{soll}} + (0,00 \pm 0,21)\text{nm}$.

A.3. Messung und Auswertung der Intensitätsspektren

Um die Schwankungen der Transmissionsspektren wiedergeben zu können, ist die Kenntnis der Fluktuationen in den Intensitätsspektren von ausschlaggebender Bedeutung. Die Charakterisierung erfolgt über die beiden Parameter ΔI_{abs} und ΔI_{rel} , welche den absoluten und den intensitätsabhängigen Anteil der Intensitätsschwankungen beschreiben.

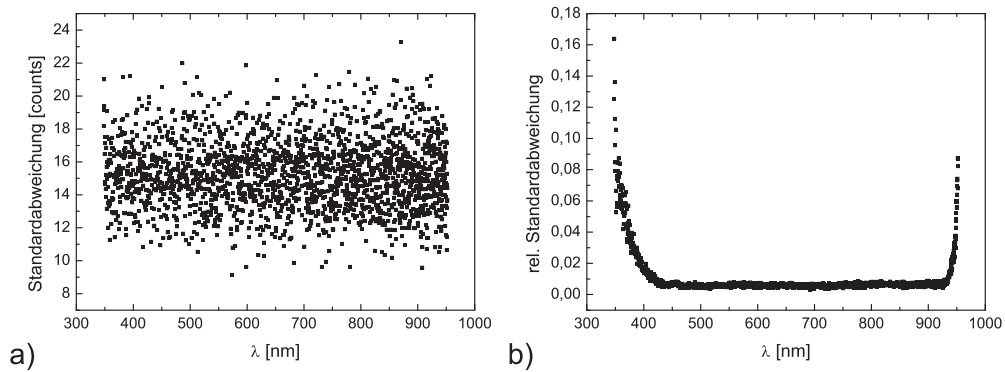


Abbildung A.12.: a) Standardabweichungen der gemessenen Dunkelspektren in Abhängigkeit der Wellenlänge und b) Wellenlängenabhängigkeit der relativen Standardabweichung der gemessenen Intensitätsspektren der Lampe (ohne ΔI_{abs})

Zur Bestimmung von ΔI_{abs} wurden 30 Dunkelspektren gemessen, um deren Standardabweichung ermitteln zu können, welche in Abbildung A.12a) als Funktion der Wellenlänge dargestellt sind. Aus Messungen des Lampenspektrums (Abbildung A.13) lässt sich ΔI_{rel} in Abhängigkeit der Wellenlänge ermitteln. Auch in diesem Fall wurden 30 Messungen durchgeführt und berücksichtigt, dass auch diese Messwerte mit ΔI_{abs} behaftet sind. Der wellenlängenabhängige Parameter ΔI_{rel} , welcher in Abbildung A.12b) dargestellt ist, bezeichnet den Quotienten aus der Standardabweichung der verbleibenden intensitätsabhängigen Schwankung und der Intensität des Lampenspektrums bezogen auf eine Wellenlänge. Im Fall von OptiMon sind die gemessenen Transmissionsspektren auf einen Wellenlängenbereich von 400 bis 920 nm beschränkt. ΔI_{rel} kann somit in guter Näherung als obere Schranke des waagerechten Kurvenabschnitts in Abbildung A.12b) festgelegt werden.

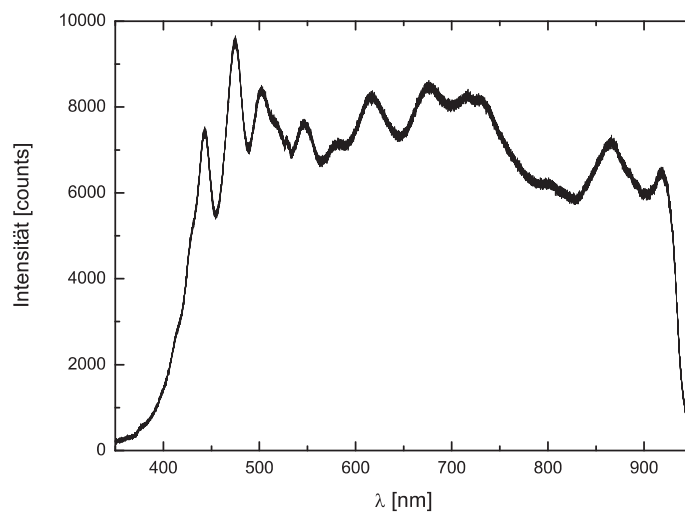


Abbildung A.13.: 30 gemessene Intensitätspektren der Lampe

Ausgehend von den Schwankungen der Intensitätspektren lässt sich die einfache Standardabweichung des Lampenspektrums bezogen auf die Transmission berechnen, welche in Abbildung A.14 als Funktion der Wellenlänge dargestellt ist.

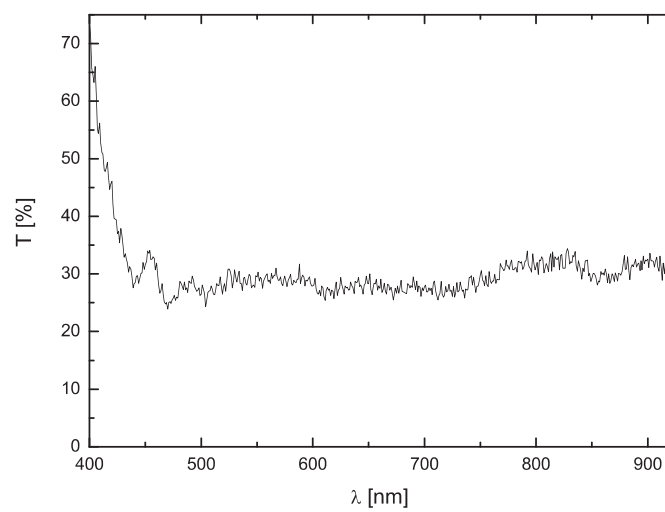


Abbildung A.14.: Einfache Standardabweichung des Lampenspektrums als Funktion der Wellenlänge

Anhang B.

Mehrschichtsysteme

In den folgenden beiden Abbildungen sind die mittels Röntgenreflektometrie gemessenen Intensitätsspektren dargestellt, sowie die durch des Auswerteprogramms GenX simulierten Spektren.

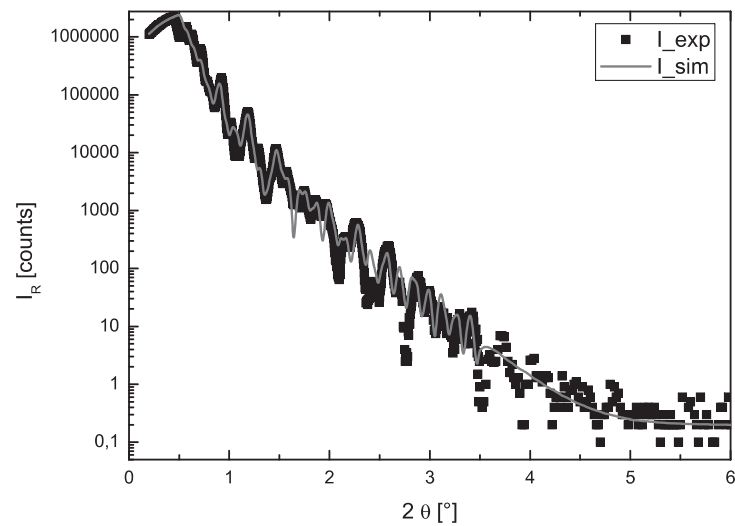


Abbildung B.1.: Gemessenes (Punkte) und mittels GenX simuliertes (Linie) Intensitätsspektrum von AR-Design 1

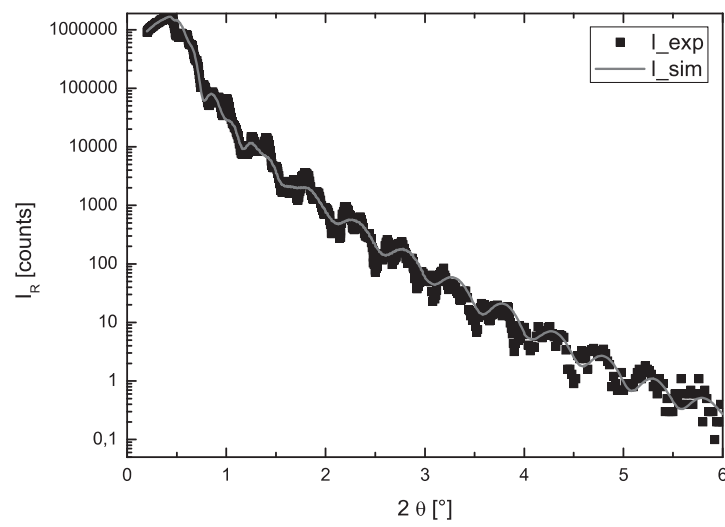


Abbildung B.2.: Gemessenes (Punkte) und mittels GenX simuliertes (Linie) Intensitätspektrum von AR-Design 2

Literaturverzeichnis

- [Azi05] E.-S. Aziz, C. Chassapis. *A decision-making framework model for design and manufacturing of mechanical transmission system development*. Engineering with Computers, **21**, (2005) 164.
- [Bad07] B. Badoil, F. Lemarchand, M. Cathelinaud, M. Lequime. *Interest of broadband optical monitoring for thin-film filter manufacturing*. Appl. Optics, **46**, (2007) 4294.
- [Bir74] J. Birchak, L. Gardner, J. Hipp, J. Victor. *High dielectric constants microwave probes for densing soil moisture*. Proc. IEEE, **62**, (1974) 93.
- [Bjö07] M. Björck, G. Andersson. *GenX: an extensible X-ray reflectivity refinement program utilizing differential evolution*. J. Appl. Cryst., **40**, (2007) 1174.
- [Bor81] J. Borgogno, P. Bousquet, F. Flory. *Inhomogeneity in films: limitation of the accuracy of optical monitoring of thin films*. Appl. Optics, **20**, (1981) 90.
- [Dob76] J. A. Dobrowolski. *Modern computational methods for optical thin film systems*. Thin Solid Films, **34**, (1976) 313.
- [Gen] *GenX*. <http://genx.prog.googlepages.com>.
- [Ham] *Hamamatsu Television Europe GmbH*. R269 data sheet.
- [Hol79] C. Holm. *Optical thin film production with continuous reoptimization of layer thicknesses*. Appl. Optics, **18**, (1979) 12.
- [Jet] *JETI Technische Instrumente GmbH*. <http://www.jeti.com>.
- [Keh04] M. Kehr. *Optimierung des XRD 3000PTS für Diffraktometrie und Reflektometrie an dünnen Schichten*. Diplomarbeit, Technische Universität Chemnitz (2004).

- [Kin69] K. Kinoshita, M. Nishibori. *Porosity of MgF_2 films - evaluation based on changes in refractive index due to absorption of vapors*. J.Vac.Sci. Technol., **6**, (1969) 730.
- [Laa77] C. J. V. der Laan, H. J. Frankena. *Monitoring of optical thin films using a quartz crystal monitor*. Vacuum, **27**, (1977) 391.
- [Lan74] Landau, Lifschitz. *Elektrodynamik der Kontinua*. Akademie-Verlag Berlin, 1974.
- [Lan00] N. A. Langrana, D. Qiu, E. Bossett. *Virtual simulation and video microscopy for fused deposition methods*. Materials and Design, **21**, (2000) 75.
- [LCa] *LCalc Software*. For contact: lcalc@coating-characterization.com.
- [Lip97] S. G. Lipson, H. S. Lipson, D. S. Tannhauser. *Optik*. Springer-Verlag, 1997.
- [Mac81] H. A. Macleod. *Monitoring of optical coatings*. Appl. Optics, **20**, (1981) 82.
- [NMa] *NMath numerical libraries*. <http://www.centerspace.net>.
- [Ste96] O. Stenzel. *Das Dünnschichtspektrum*. Akademie Verlag, 1996.
- [Ste09a] O. Stenzel. *A model for calculating the effect of nanosized pores on refractive index, thermal shift and mechanical stress in optical coatings*. J. Phys. D: Appl. Phys., **42**, (2009) 055312.
- [Ste09b] O. Stenzel, S. Wilbrandt, N. Kaiser, M. Vinnichenko, F. Munnik, A. Kohlitsch, A. Chuvilin, U. Kaiser, J. Ebert, S. Jakobs, A. Kaless, S. Wuethrich, O. Treichel, B. Wunderlich, M. Bitzer, M. Grössl. *The correlation between mechanical stress, thermal shift and refractive index in HfO_2 , Nb_2O_5 , Ta_2O_5 and SiO_2 layers and its relation to the layer porosity*. Thin Solid Films, **21**, (2009) 6058.
- [Sul92] B. T. Sullivan, J. A. Dobrowolski. *Deposition error compensation for optical multilayer coatings. I. Theoretical description*. Appl. Optics, **31**, (1992) 3821.
- [SYR] *Leybold Optics GmbH*. Benutzerhandbuch SYRUSpro 1100.

- [TAC] *Tailored Automated Coating*. <http://www.taco-net.de>.
- [Tha] *Thales Electron Devices*. FK61 Series - technical specification.
- [Tho82] W. P. Thoeni. *Deposition of optical coatings: process control and automation*. Thin Solid Films, **88**, (1982) 385.
- [Tika] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. *OptiLayer Thin Film Software*. <http://www.optilayer.com>.
- [Tikb] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. *OptiMon.dll*. For contact: lcalc@coating-characterization.com.
- [Tik93] A. V. Tikhonravov. *Some theoretical aspects of thin-film optics and their applications*. Appl. Optics, **5417**, (1993) 32.
- [Tik97] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, B. Sullivan. *Influence of small inhomogeneities on the spectral characteristics of single thin films*. Appl. Optics, **36**, (1997) 7188.
- [Tik03] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, A. A. Tikhonravov. *Effects of interface roughness on the spectral properties of thin films and multilayers*. Appl. Optics, **42**, (2003) 5140.
- [Tik04] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. *On-line characterization and reoptimization of optical coatings*. Proc. SPIE, **5250**, (2004) 406.
- [Tik05] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. *Computational manufacturing as a bridge between design and production*. Appl. Optics, **44**, (2005) 32.
- [Tik06] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, T. V. Amotchkina. *Investigation of the effect of accumulation of thickness errors in optical coating production by broadband optical monitoring*. Appl. Optics, **45**, (2006) 7026.
- [Tik07] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, T. V. Amotchkina. *Computational experiments on optical coating production using monochromatic monitoring strategy aimed at eliminating a cumulative effect of thickness errors*. Appl. Optics, **46**, (2007) 6936.

- [Tol99] M. Tolan. *X-Ray Scattering from Soft-Matter Thin Films*. Springer Berlin Heidelberg, 1999.
- [Vid78] B. Vidal, A. Fornier, E. Pelletier. *Optical monitoring of nonquarterwave multiplayer filters*. Appl. Optics, **17**, (1978) 1038.
- [Wil02] R. R. Willey. *Practical Design and Producibility of Optical Thin Films*. Marcel Dekker Inc., 2002.
- [Wil08] S. Wilbrandt, O. Stenzel, N. Kaiser. *In situ optical characterization and reengineering of interference coatings*. Appl. Optics, **47**, (2008) 13.
- [Zoe05a] A. Zoeller, M. Boos, R. Goetzelmann, H. Hagedorn, W. Klug. *Substantial progress in optical monitoring by intermittent measurement technique*. Proc. SPIE, **5963**, (2005) 105.
- [Zoe05b] A. Zoeller, M. Boos, H. Hagedorn, W. Klug, C. Schmitt. *High accurate in situ optical thickness monitoring for multilayer coatings*. Proceedings of the 47th Annual SVC Conference, 72.

Danksagung

Ich möchte im Folgenden Prof. Dr. Andreas Tünnermann und Prof. Dr. Norbert Kaiser vom Fraunhofer IOF für die Möglichkeit danken, meine Diplomarbeit durchführen zu können. Ein besonderer Dank geht an Dr. Olaf Stenzel (IOF) für die Bereitstellung des Diplomthemas und die Betreuung während meiner Arbeit, sowie an Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann von der TU Chemnitz.

Zusätzlich möchte ich mich bei Dr. Steffen Wilbrandt für die Hilfe bei der Programmierung und Heidi Haase für die tatkräftige Unterstützung bei Beschichtung und Messung danken, sowie allen anderen Mitarbeitern des Fraunhofer IOF für das angenehme Arbeitsklima.

Alexander V. Tikhonravov und Michael K. Trubetskov vom Research Computing Center, Moscow State University möchte ich für die Bereitstellung des Auswertalgorithmus zur Schichtdickenbestimmung danken, sowie der schnellen Weiterentwicklung des Algorithmus für die Anwendung in der Simulation.

Des Weiteren gilt mein Dank Prof. Dr. Walter Hoyer von der TU Chemnitz für die Unterstützung während meines Studiums und die Genehmigung der Messungen am Röntgendiffraktometer. Allen Mitarbeitern der Professur für Röntgen- und Neutrendiffraktometrie möchte ich für das angenehme Arbeitsklima während meiner Zeit in der Gruppe danken, sowie im Besonderen Mirko Kehr für die Hilfe bei der Messung und Auswertung der Röntgenreflektometriemessungen.

Ebenfalls bedanken möchte ich mich bei meinem Freund Markus Köhler und meiner Familie für die moralische Unterstützung und die Korrektur meiner Arbeit.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt, nicht anderweitig zu Prüfungszwecken vorgelegt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe. Sämtliche wissentlich verwendete Textausschnitte, Zitate oder Inhalte anderer Verfasser wurden ausdrücklich als solche gekennzeichnet.

Jena, den 28. September 2009

Karen Friedrich

